

Miljøprojekt Nr. 765 2003  
Teknologiudviklingsprogrammet for  
jord- og grundvandsforurening.

## Modellering af optagelse af organiske stoffer i grøntsager og frugt

Lise Samsøe-Petersen og Dorte Rasmussen  
DHI Institut for Vand og Miljø, Økotoxikologisk afdeling

Stefan Trapp  
Danmarks Tekniske Universitet,  
Institut for Miljø og Ressourcer

Miljøstyrelsen vil, når lejligheden gives, offentliggøre rapporter og indlæg vedrørende forsknings- og udviklingsprojekter inden for miljøsektoren, finansieret af Miljøstyrelsens undersøgelsesbevilling.

Det skal bemærkes, at en sådan offentliggørelse ikke nødvendigvis betyder, at det pågældende indlæg giver udtryk for Miljøstyrelsens synspunkter.

Offentliggørelsen betyder imidlertid, at Miljøstyrelsen finder, at indholdet udgør et væsentligt indlæg i debatten omkring den danske miljøpolitik.

# Indhold

<b>FORORD</b>	<b>7</b>
<b>SAMMENFATNING OG KONKLUSIONER</b>	<b>9</b>
<b>SUMMARY AND CONCLUSIONS</b>	<b>15</b>
<b>1 INDLEDNING</b>	<b>21</b>
1.1 FORMÅL	21
1.2 BAGGRUND	21
1.3 PROJEKTET	22
<b>2 FORHOLD AF BETYDNING FOR KONCENTRATIONEN AF ORGANISKE STOFFER I AFGRØDER</b>	<b>25</b>
2.1 MEKANISMER FOR OPTAGELSE OG TRANSPORT AF ORGANISKE STOFFER I PLANTER	26
2.1.1 <i>Generelt</i>	26
2.1.2 <i>Direkte kontakt med jorden</i>	27
2.1.3 <i>Fordampning fra jorden til blade og frugter</i>	28
2.2 PLANTENS FYSIOLOGI	28
2.3 BETYDNINGEN AF PLANTENS VÆKST OG OMSÆTNING AF STOFFERNE I PLANTEN	30
2.3.1 <i>Vækst</i>	30
2.3.2 <i>Omsætning</i>	30
<b>3 TILGÆNGELIGHED I JORDEN</b>	<b>33</b>
3.1 FØRSØG I VAND	33
3.2 FORHOLDENE I JORD	33
3.3 ÆLDNING OG TILGÆNGELIGHED	33
3.4 MODELLERNES GRUNDLAG	34
3.5 TRANSPORT I JORDEN	34
3.6 MÅL FOR TILGÆNGELIGHED	34
3.7 SAMMENDRAG OG KONKLUSION	37
<b>4 MODELLER TIL BESKRIVELSE AF OPTAGELSE FRA JORD OG TRANSPORT I PLANTER</b>	<b>39</b>
4.1 FORDELING I JORDEN	39
4.1.1 <i>Beregning af koncentrationen i jordens poreluft og -vand</i>	40
4.1.2 <i>Modeller til simulering af ældning</i>	42
4.2 TRANSPORT I JORDEN	43
4.2.1 <i>Transporthastighed gennem jorden</i>	43
4.2.2 <i>Koncentrationen i luften omkring bladene</i>	44
4.3 MODELLER TIL ESTIMERING AF PLANTEOPTAGET	47
4.3.1 <i>Fordelings- og regressionsmodeller</i>	47
4.3.2 <i>Travis &amp; Arms' regressionsligning</i>	53
4.4 DYNAMISKE MODELLER	55
4.4.1 <i>Optagelse gennem rødderne</i>	55
4.4.2 <i>Optagelse gennem bladene</i>	56
4.4.3 <i>Optagelse via direkte jordkontakt</i>	56
4.4.4 <i>Transport i vedvæv</i>	57

4.4.5	Transport i sivæv	57
4.4.6	Vækst	57
4.4.7	Omsætning og andre nedbrydningsprocesser	57
4.4.8	Generisk 'one-compartment' model for optagelse i 'overjordiske' plantedele	58
4.4.9	'Four-compartment' optagelsesmodel PlantX	58
4.4.10	'Three-compartment' model med flygtighedsprincip fra Mackay	58
4.4.11	Model for planteoptagelse, transport, akkumulering og bionedbrydning, UTAB	59
4.4.12	Gulerodsmodellen - Advektion ind i rødder	59
4.4.13	Kartoffelmodellen - diffusiv optagelse i en kugleformet rod	60
4.4.14	Transport til frugter på træer	60
4.4.15	Simuleringsnetværksmodel for atmosfære-plantе-jord, SNAPS	61
4.5	RISIKOVURDERINGSVÆRKTØJER	61
4.5.1	England: Contaminated Land Exposure Assessment model, CLEA	61
4.5.2	Tyskland: Umweltmedizinische Beurteilung der Exposition des Menschen durch alllastbedingte Schadstoffe, UMS	61
4.5.3	Californien: CalTOX	61
4.5.4	Holland: CSOIL	62
4.5.5	USA: Soil Screening Guidance SSG	62
4.5.6	Europa: Technical Guidance Document of the European Union System for the Evaluation of Substances, EUSES	62
4.5.7	Konklusion	62
<b>5</b>	<b>VALIDERING AF MODELLERNE</b>	<b>65</b>
5.1	TIDLIGERE VALIDERINGSSTUDIER	65
5.1.1	Valideringsstudier af SAP-modellen	65
5.1.2	Polder et al: Validering af Briggs' regressionsligninger	65
5.1.3	Jager & Hamers: Validering af Trapps regressionudtryk	65
5.1.4	Schwartz et al.: Validering af TGD-blad beskrivelse af optaget i blade	66
5.1.5	Versluijs et al.: Validering af TGD-rod og TGD-blad	66
5.1.6	Andre	67
5.1.7	Opsummering af tidligere valideringsstudier	67
5.2	SAMMENLIGNING AF MODELLERNE OG MÅLTE DATA	67
5.2.1	'Underjordiske' afgrøder	67
5.2.2	Bladafgrøder	70
5.2.3	Frugt og bær	72
5.3	BESKRIVELSE AF ANVENDELIGHED	72
<b>6</b>	<b>UDVÆLGELSE AF MODELLER OG SCENARIER</b>	<b>75</b>
6.1	PLANTEOPTAGSMODELLER	75
6.1.1	Udvælgelsesproces for planteoptagsmodeller	75
6.2	STOFFERNES BEVÆGELSE I JORDSYSTEMET	76
6.2.1	Beregning af koncentrationen i de tre faser	77
6.2.2	Transport i jorden	77
6.2.3	Fordampning og koncentration i luften	77
6.3	UDVÆLGELSE AF AFGRØDER	77
6.4	UDVÆLGELSE AF JORDE	78
<b>7</b>	<b>BEREGNINGSEKSEMPLER</b>	<b>81</b>
7.1	BEREGNINGSSCENARIER	81
7.2	BEREGNINGSRISIKO	82
7.2.1	Betydning af jorddække	82
7.2.2	Beregnete BCF-værdier	83
7.2.3	Ældningens betydning	88

7.3 FØLSOMHEDSANALYSE	89
7.3.1 <i>Identifikation af parametre</i>	89
7.3.2 <i>Monte-Carlo simuleringer</i>	91
7.4 SAMMENFATNING	97
<b>8 PRAKTISK BRUG AF MODELLEN I FORBINDELSE MED AFVÆRGEFORANSTALTNINGER</b>	<b>99</b>
8.1 UDVIKLET MODELVÆRKTØJ	99
8.2 EKSEMPLER PÅ ANVENDELSE AF MODELLERNE	101
8.3 BESKRIVELSE AF MODELVÆRKTØJETS EVENTUELLE BEGRÆNSNINGER OG SVAGHEDER	101
8.3.1 <i>De enkelte modeller</i>	101
8.3.2 <i>Fællestræk ved modellerne</i>	102
8.3.3 <i>Krav til modelværktøjet</i>	103
8.4 PRAKTISK ANVENDELSE AF MODELVÆRKTØJET	104
<b>SYMBOLLISTE</b>	<b>105</b>
<b>LITTERATUR</b>	<b>107</b>
<b>BILAG A GENERIC ONE-COMPARTMENT MODEL FOR UPTAKE INTO AERIAL PLANT PARTS ("TGD-BLAD")</b>	<b>117</b>
<b>BILAG B THE "CARROT MODEL"</b>	<b>119</b>
<b>BILAG C POTATO MODEL (DRAFT)</b>	<b>123</b>
<b>BILAG D FRUIT TREE MODEL</b>	<b>129</b>
<b>BILAG E DIRECT SOIL CONTACT</b>	<b>133</b>
<b>BILAG F SOIL-AIR-PLANT TRANSPORT MODEL SAP</b>	<b>135</b>
<b>BILAG G JURY-MODEL FOR TRANSPORT IN SOIL</b>	<b>137</b>
<b>BILAG H SAMMENLIGNING MED MARKFORSØG</b>	<b>141</b>
<b>BILAG I PLANTEPARAMETRE</b>	<b>145</b>



# Forord

Miljøstyrelsen gennemførte i årene 1999-2000 undersøgelser af indholdet af PAH-forbindelser og metaller i grøntsager og frugt, dyrket i forurenede jord. Undersøgelserne var rettet mod opstilling af retningslinjer for beboere i lettere forurenede områder og udgjorde en del af grundlaget for udarbejdelsen af Vejledning fra Miljøstyrelsen nr. 7, 2000, Rådgivning af beboere i lettere forurenede områder.

Undersøgelsen omhandlede udelukkende direkte kontakt mellem planterne og kraftigere forurenede jord (koncentrationer over "afskæringskriterierne"), og den fokuserede på PAH-forbindelser og bly.

Hvorvidt, koncentrationer over afskæringskriterierne *i den dybereliggende jord* – hvor jorden ikke er i direkte kontakt med de spiselige dele af planten men kun i kontakt med plantens rodnet - udgør et problem i forhold til transport fra rødderne ud til andre dele af planten eller ved fordampning, er usikkert. Der mangler desuden viden om, hvorvidt de øvrige forureningskomponenter, der er relevante i forbindelse med jord- og grundvandsforureningsager (under Lov om forurenede jord), udgør et sundhedsmæssigt problem i forhold til optagelse i planter. De hyppigst forekommende forureningskomponenter i sådanne sager er - ud over PAH-forbindelser og metaller - olieprodukter (benzin, diesel- og fyringsolie samt tungere olier) samt klorerede opløsningsmidler.

Til belysning af disse problemer igangsatte Miljøstyrelsens Jordforureningskontor i slutningen af 2001 dette projekt.

Projektet blev fulgt af en styregruppe, nedsat af Miljøstyrelsen:

Preben Bruun, Miljøstyrelsen, Jordforureningskontoret (formand)  
Lise Samsøe-Petersen, DHI institut for Vand og Miljø (projektleder)  
Arne Helweg, Danmarks JordbrugsForskning  
Ole Ladefoged, Fødevarerdirektoratet  
Poul Bo Larsen, Miljøstyrelsen





# Sammenfatning og konklusioner

Projektets formål var at redegøre for en metode eller et grundlag til beskrivelse/vurdering af sammenhængen mellem forureningsniveau af organiske forureningskomponenter i jord (og poreluft) og i grøntsager og frugt samt at opstille forslag til, hvordan man på baggrund af ovenstående kan udarbejde retningslinjer til anvendelse ved risikovurdering af optagelse af forureningskomponenter i grøntsager og frugt fra jordforureninger.

Tidligere undersøgelser havde belyst betydningen af direkte kontakt mellem spiselige dele af grøntsager og jord forurenet med PAH-forbindelser og metaller i niveauer omkring Miljøstyrelsens afskæringskriterier. Derfor var fokus for projektet, hvorvidt koncentrationer over afskæringskriterierne i den dybereliggende jord – hvor jorden ikke er i direkte kontakt med de spiselige dele af planten men kun i kontakt med plantens rodnet - udgør et problem på grund af transport fra rødderne til andre dele af planten eller ved fordampning fra jorden med efterfølgende optagelse i overjordiske dele. Endvidere ønskedes alle almindeligt forekommende organiske forureningskomponenter inddraget, herunder specielt olieprodukter og klorerede opløsningsmidler.

Denne målbeskrivelse er udmøntet i udvikling af et beslutningsstøtteværktøj, der er baseret på matematiske modeller, hvor der er lagt særlig vægt på inddragelse af vandopløselige og flygtige stoffer i beregningerne.

I rapporten beskrives indledningsvis de forhold, der har betydning for koncentrationen af organiske stoffer i afgrøder, herunder mekanismer for optagelse og transport af organiske stoffer i planter, hvilken del af planten, der anvendes samt fortynding ved plantens vækst og omsætning af stofferne. Desuden diskuteres betydningen af stoffernes opholdstid i jorden ("ældning") for deres tilgængelighed for planterne samt de forudsætninger vedrørende tilgængelighed, der er indlagt i eksisterende modeller.

Eksisterende modeller til beskrivelse af stoffernes fordeling og transport i jorden og deres optagelse i planter gennemgås og diskuteres, og der gives en kort oversigt over eksisterende, modelbaserede risikovurderingsværktøjer.

Med henblik på udvælgelse af modeller til beslutningsstøtteværktøjet gennemgås tidligere valideringsstudier af de forskellige modeller, og beregnede værdier sammenlignes med målte data fra to undersøgelser, der er gennemført i PAH- og PCB-forurenet jord. Der foreligger ikke eksperimentelle data for mere mobile stoffer. Generelt viser sammenligningen med målte værdier, at modellerne tenderer mod at overestimere optagelsen i planterne med op til en faktor 10, om end der er undtagelser herfra. Dette skyldes sandsynligvis, at flere forhold, der reducerer koncentrationen i planterne ikke er medtaget i de pågældende modeller; f.eks. ældning i jorden, nedbrydning/omsætning af stofferne i planten. Det understreges dog, at datagrundlaget fra de eksperimentelle studier er spinkelt, og at variationen er stor. Datagrundlaget til validering af beskrivelsen af optaget af stoffer i frugt er ikke tilstrækkeligt, men det vurderes, at da fordampning af stofferne fra frugter ikke er medtaget, er optaget i frugt sandsynligvis overestimeret.

Der er opstillet kriterier for udvælgelse af modeller til projektet og udvalgt modeller til beskrivelse af stoffernes optagelse og transport i planter samt deres bevægelse i jorden. Endvidere er de scenarier og afgrøder, der anvendes ved de efterfølgende beregninger, beskrevet.

Det på baggrund af ovenstående sammensatte modelværktøj omfatter beregning af

- koncentrationen i jordens 3 faser (vand, luft og fast fase) ved simple fordelingsligninger
- transporten i jorden ved Jurys model
- fordampning fra jorden ved Jurys model, og koncentrationen i luften ved anvendelse af principperne i Jagg-modellen, idet opblandingshøjden dog sættes lig den enkelte afgrødes højde
- optagelse i afgrøderne ved afgrødespecifikke modeller for
  - kartoffel ved model udviklet i projektet
  - gulerod (og andre rodafgrøder) ved model af Trapp
  - bladafgrøder ved model som i EUSES (TGD-blad) samt ved Soil-Air-Plant-model
  - frugt og bær ved model udviklet i projektet

Der gennemføres beregninger:

- for otte stoffer: MTBE, toluen, *n*-dodecan, trichlorethen, naphthalen, benzo(a)pyren, benzen og tetrachlorethen
- for to jorde: en jord med almindeligt og en jord med lavt indhold af organisk kulstof
- for dæklag af ren jord: intet og et dæklag på 0,5 m. Ved beregninger med dæklag, anvendes den gennemsnitlige koncentration i plantens roddebyde til beregning af den mængde, der suges op sammen med vandet, mens den gennemsnitlige koncentration i det lag, hvor rodfrugten ligger, anvendes ved beregninger af den diffusive transport ind i rodfrugten. Den gennemsnitlige koncentration i overfladelaget (her sat til 2 cm) anvendes ved jordstænk. Beregningerne udføres efter 1 år og efter 10 år fra det tidspunkt, hvor dæklaget er lagt på.
- med og uden hensyntagen til ældning
- for følgende afgrøder: kartofler, gulerødder, salat, grønkål, æbler, bær på buske, jordbær, nødder

De parametre, der indgår i modellerne – og de valgte værdier – er søgt udvalgt, så de repræsenterer en realistisk ”værst tænkelig” situation. I nogle tilfælde er der dog tale om urealistiske forhold, hvor planteoptaget overestimeres, f.eks. er omsætning af stofferne i planten sat til nul i alle modeller, og fordampning af stof fra planten er ikke medtaget i frugttræsmodellen på grund af manglende data.

Med henblik på udvælgelse af de afgrøder, der bidrager mest til indtagelse af organiske stoffer, er det beregnede planteoptag koblet med et forventet dagligt indtag af udvalgte typer afgrøder. Herved beregnes den forventede daglige indtagelse af hvert enkelt stof med hver enkelt af de otte afgrøder. Beregningerne viser, at

- når der ikke lægges et lag ren jord over den forurenede jord, så er kartoffel den afgrøde, der bidrager mest til det potentielle daglige humane indtag af miljøfremmede, organiske stoffer via afgrøder
- når der lægges et rent lag jord over den forurenede jord, er andre rodfrugter end kartofler de mest kritiske afgrøder for de anvendte PAH-forbindelser, kartoffel er det stadig for n-dodecane og frugt er den mest kritiske afgrødetype for de øvrige, mere mobile modelstoffer.

Dette afspejler tildels, at kartofler og æbler/pærer er de mest spiste afgrøder i Danmark. Resultaterne for de mindre mobile stoffer er i overensstemmelse med resultater af tidligere udførte undersøgelser i forurenede jord, der viste, at direkte kontakt med den forurenede jord kunne give høje koncentrationer af stofferne i rodafgrøder (inklusive kartoffel), mens afgrøder, der ikke var i direkte kontakt med jorden, indeholdt væsentligt lavere koncentrationer. Det kan synes overraskende, at optagelsen af miljøfremmede stoffer i frugt fra jorden skulle have større betydning for den daglige indtagelse end optagelsen i kartofler eller andre rodfrugter. Dette er kun tilfældet, hvor der er et dæklag af ren jord oven på den forurenede, så rodafgrøderne ikke er i direkte kontakt med forureningen, og for mobile stoffer, der kan optages gennem planternes rødder, hvor træerødderne antages at stikke dybere end grøntsagsrødder. Endvidere skal det understreges, at der i frugttræsmodellen ikke er regnet med fordampning af stofferne fra plantens (frugtens) overflade. Der foreligger ikke eksperimentelle data fra forurenede jord til at verificere eller modificere beregningerne for mobile stoffers optag i frugt.

Der er gennemført en følsomhedsanalyse af modellerne for kartoffel, gulerod (andre rodfrugter) og frugttræer. Den viser, at hvis alle indgående parametre varieres samtidig, er standardafvigelsen på de beregnede BCF-værdier for både kartoffel og frugt under en størrelsesorden. Det vil sige, at det har begrænset betydning, hvis en eller flere af de parametre, der anvendes i modellen, ikke er præcist bestemt. Ved anvendelse af modellerne er det relevant at vide hvilke parametre, det er vigtigst at anvende en præcist bestemt værdi for. Derfor er betydningen af variation i de enkelte parametre analyseret for de tre vigtigste modeller.

Kartoffelmodellen er mest følsom for variation i parametrene, når der regnes på de meget lidt mobile stoffer, hvor der ikke kan antages ligevægt mellem rodfrugten og jorden. For disse stoffer er de parametre, der giver størst variation i kartoffelmodellens resultat, kartofflens størrelse og delvis luftvolumenet samt dyrkningsperioden.

For gulerodsmodellen (der anvendes for flere rodfrugter) viser følsomhedsanalysen, at lipidindholdet i rodfrugterne og stoffernes  $\log K_{ow}$  har betydning for optagelsen i rodfrugterne, medens luft-vand fordelingskoefficienten kun har mindre betydning for resultaterne.

Frugttræsmodellen er mest følsom for ændringer i  $\log K_{ow}$  for alle undersøgte stoffer undtagen det mindst sorberende stof, MTBE. For MTBE er modellen meget robust over for variation i alle parametre, og karakteriseringen af jorden er den parameter, der er mest betydningsfuld. De anvendte karakteristika for planten har kun mindre betydning for den beregnede BCF-værdi.

Det udviklede modelværktøj er indbygget i en Excel-fil, hvor de modeller, der anbefales anvendt til de enkelte afgrødetyper og til beregning af stoffernes

transport i jorden, er "programmeret". I regnearket er der desuden indlagt mindre databaser med stofdata for projektets modelstoffer, jorddata for forskellige danske jordtyper og plantedata for de enkelte modelplanter. Disse databaser kan nemt udvides med flere data.

Der er således udviklet et modelværktøj, der:

- kan estimere hvilke koncentrationer, der vil opnås i typiske danske afgrøder, som dyrkes på forurenede jord med eller uden dæklag af ren jord
- ved sammenligning med ADI (hvor der også tages hensyn til andre eksponeringskilder) kan afklare, om de jordkoncentrationer, der svarer til jordkvalitetskriterier eller til at afdampningskriterier er overholdt over terræn, vil give anledning til kritiske koncentrationer i de relevante afgrøder.
- kan identificere hvilke(n) afgrødetype(r), der må forventes at være de(n) kritiske frem for andre i en given situation
- kan prioritere de områder, der skal gennemføres afværgeforanstaltninger for

Modellerne gælder kun for ikke-ioniserbare og ikke-polære stoffer.

Det er en forudsætning for anvendelse af modelberegninger til risikovurderinger, at beregningerne giver nogenlunde realistiske (men stadigvæk konservative) resultater.

Modelværktøjets begrænsning er først og fremmest, at det er baseret på en række konservative forudsætninger og parametre (f.eks. manglende fordampning fra frugter, ingen omsætning i planten), der ikke vil være realistiske i alle situationer; værktøjet forventes med andre ord at overestimere optagelsen i afgrøderne. Ved at basere risikovurderinger på disse beregninger vil vurderinger, der viser lav risiko – og dermed ikke behov for (yderligere) afværgeforanstaltninger - være velbegrandede, mens afværgeforanstaltninger, der er baseret på vurdering af høj risiko, i realiteten kan være overflødige.

De gennemførte beregninger og sammenligninger med det begrænsede datamateriale fra eksperimentelle undersøgelser viser dog, at modelværktøjet er fuldt på højde med tilsvarende værktøjer, der anvendes i andre lande, både hvad angår "præcisionen" af estimerne og modellernes robusthed over for variationer i de enkelte parametre. De delmodeller for enkeltafgrøder (specielt kartoffel- og frugtræsmodellen), der er udviklet og medtaget i værktøjet, øger desuden anvendeligheden betydeligt.

På baggrund af projektets resultater vurderes det, at modelværktøjet kan anvendes til udarbejdelse af risikovurderinger. Dette kræver imidlertid, at:

- der foreligger sundhedsmæssige vurderinger – f.eks. i form af værdier for acceptabel daglig indtagelse (ADI) - for de enkelte stoffer
- der bør gennemføres undersøgelser, der kan be- eller afkræfte modellernes resultater, specielt forudsigelsen af, at mobile stoffer vil blive optaget fra jorden og ophobet i frugter

- modelværktøjets anvendelighed vurderes ved gennemførelse af beregninger ved forskellige scenarier, hvor de parametre, der indlægges i databaserne, baseres dels på "værst tænkelige"-forudsætninger (som de er nu), dels på mere realistiske forudsætninger

Afhængigt af udfaldet af sådanne scenarieberegninger vil resultaterne kunne bruges til at opstille retningslinier for, hvordan risikoen i typiske forureningssituationer afklares, herunder omfanget af de nødvendige afværgeforanstaltninger.



# Summary and conclusions

The objective of the project was to review a method or a basis for describing/assessing the relation between the level of contamination with organic pollutants in the soil (and pore air) and the level in vegetables and fruits. Based on the above method/basis, a proposal should be made for the preparation of guidelines to be applied in risk assessment of the uptake of pollutants in vegetables and fruits from soil contaminations.

Previous studies had illustrated the consequences of direct contact between edible parts of vegetables and soil contaminated with PAHs and metals at levels close to the Danish EPA cut-off criteria. This project was thus focussed on whether concentrations above the cut-off criteria in the underlying soil - where the soil is not in direct contact with the edible parts of the plant but only with the roots of the plant - pose a problem because of the transport from the roots to other parts of the plant or evaporation from the soil with subsequent uptake in the parts of the plant above the soil. Furthermore, all common organic pollutants should be included, among these especially oil products and chlorinated solvents.

This statement of aims resulted in the development of a decision-support tool based on mathematical models, in which great importance was attached to the inclusion of water-soluble and volatile substances in the calculations.

The report introduction describes the mechanisms governing the concentrations of organic substances in the crops including the mechanisms of uptake and transport of organic substances in plants, which part of the plant is used as well as dilution because of the growth of the plant and metabolization of the substances. Furthermore, the importance of the residence time of the substances in the soil ("aging") to their availability to the plants is discussed together with the assumptions regarding availability included in existing models.

Existing models for the description of the distribution and transport of the substances in the soil and their uptake in plants are examined and discussed, and a brief summary of existing model-based risk assessment tools is given.

With regard to a selection of models for the decision-support tool, previous validation studies of the different models were examined and estimated values compared with measured data from two investigations carried out in soils contaminated with PAH and PCB. No experimental data on more mobile substances are available. In general, comparison with measured values indicates that the models tend to overestimate the uptake in the plants with a factor of up to 10 though exceptions were seen. This is probably due to the fact that several circumstances reducing the concentration in the plants are not included in the particular models, e.g. aging in the soil, degradation/metabolization of the substances in the plant. It should, however, be emphasized that the available data from experimental studies are scanty and that the variation is large. The available data for a validation of the description of the uptake of substances in fruit are not adequate but as the evaporation of

the substances from fruits is not included, we estimated that the uptake in fruit is probably overestimated.

Criteria were established for the selection of models for the project and models were chosen for the description of the uptake and transport in plants of the substances and their movements in the soil. Furthermore, the scenarios and crops used in the subsequent estimations were described.

The model tool composed on the basis of the above criteria and assumptions comprises the estimation of

- Concentration in the three soil phases (water, air and solid phase) by simple partition equations
- Transport in the soil by use of the Jury model
- Evaporation from the soil by use of the Jury model and concentration in the air by use of the principles in the Jagg model in which the mixing altitude is, however, fixed at the height of the individual crop
- Uptake in the crops by use of crop-specific models with respect to
  - Potato by use of a model developed in this project
  - Carrot (and other root crops) by use of the model by Trapp
  - Foliate crops by use of a model as i.e. in EUSES (TGD-leaf) and by use of the Soil-Air-Plant (SAP) model
  - Fruits and berries by use of a model developed in this project

Estimations were made

- For eight substances: MTBE, toluene, *n*-dodecane, trichloroethene, naphthalene, benzo(a)pyrene, benzene og tetrachloroethene
- For two soils: one soil with a normal and one soil with a low content of organic carbon
- For a cover layer of clean soil: No layer and a cover layer of 0.5 m. In the estimations with cover layer, the average concentration in the root depth of the plant was used to estimate the amount taken up together with the water whereas the average concentration in the layer, in which the root crop is situated, was used to estimate the diffusive transport into the root crop. The average concentration in the surface layer (fixed at 2 cm in the estimations) was used with regard to deposition of soil on the plant (soil splashes). The estimations were made one year and ten years after the establishment of the cover layer.
- With and without regard to aging
- For the following crops: Potato, carrot, lettuce, kale, apple, berries from shrubs, strawberry, nut

The intention with the selection of the parameters included in the models - and the chosen values - was that they should represent a realistic worst-case situation. In some cases, the conditions are, however, unrealistic and the plant uptake is overestimated, e.g. the metabolization of the substances in the plant is fixed at zero in all the calculations and evaporation of substance from the fruit is not included in the fruit tree model.

With regard to a selection of the crops that contribute most to the ingestion of organic substances, the estimated plant uptake was linked with the expected daily intake of selected types of crops. In this way, the expected daily intake of



each individual substance together with each of the eight crops was estimated. The estimates showed that

- When a layer of clean soil is not established on top of the contaminated soil, potato is the crop contributing the most to the potential daily human intake of organic contaminants through crops
- When a layer of clean soil is established on top of the contaminated soil, other root crops than potato are the most critical crops with respect to PAHs while potato is still the most critical with respect to n-dodecane and fruit is the most critical type of crops with respect to the other more mobile model substances.

To some extent, this reflects that potatoes and apples/pears are the most commonly eaten crops in Denmark. The results for the less mobile substances are in agreement with the results of previous investigations performed in contaminated soil showing that direct contact with the contaminated soil could result in high concentrations of the substances in root crops (including potato) whereas crops that are not in direct contact with the soil contained considerably lower concentrations. It may seem surprising that the uptake in fruit of contaminants from the soil should be of greater importance to the daily intake than the uptake in potatoes or other root crops. This is, however, only the case if a cover layer of clean soil has been established on top of the contaminated soil so that the root crops are not in direct contact with the contamination and with respect to mobile substances, which can be taken up through the roots of the plants, as tree roots are assumed to reach deeper than the roots of vegetables. Furthermore, it should be emphasized that, in the fruit tree model, evaporation of the substances from the surface of the plant (fruit) is not included. No experimental data are available for a verification or modification of the estimations of the uptake in fruit of mobile substances.

A sensitivity analysis of the potato, carrot (other root crops) and fruit tree models was performed. It showed that if all included parameters are varied at the same time, the standard deviation on the estimated BCF values for both potato and fruit was less than one order of magnitude. I.e., it is of minor importance if one or more of the parameters applied in the model are not precisely determined. When using the models, it is of relevance to know for which parameters it is most important to apply a precisely determined value. Therefore, the importance of the variation in the individual parameters was analysed for the three most essential models.

The potato model is the most sensitive with respect to variation in the parameters when the not very mobile substances, for which equilibrium between the root crop and the soil cannot be assumed, are estimated. For these substances, the parameters resulting in the largest variation in the results of the potato model, are the size of the potato and, to some extent, the air volume together with the growing period.

For the carrot model (used for several root crops), the sensitivity analysis showed that the lipid content in the root crops and the  $\log K_{ow}$  of the substances are of importance to the uptake in root crops while the air-water partition coefficient is only of minor importance to the results.

The fruit tree model is most sensitive to changes in the  $\log K_{ow}$  of all investigated substances with the exception of the least sorbing substance,

MTBE. For MTBE, the model is very robust towards variation in all parameters and the characterization of the soil is the most important parameter. The characteristics used for the plant are of minor importance to the estimated BCF value.

The developed model tool is built into an Excel file in which the models recommended for the individual types of crops and for estimation of the transport in the soil of the substances, have been programmed. In the spreadsheet, small databases have been incorporated with data on the model substances of the project, on different types of Danish soils and on the individual model plants. These databases are easily extended with more data.

A model tool has thus been developed that

- Can estimate the concentrations, which may occur in typical Danish crops grown in contaminated soil with or without a cover layer of clean soil.
- By comparing with ADI (in which other exposure routes are taken into consideration) can clarify whether the soil concentrations corresponding to the soil quality standards or to compliance with the evaporation criteria above surface will result in critical concentrations in the relevant crops.
- Can identify which type(s) of crops that must be expected to be the critical one(s) rather than others in the specific situation.
- Can prioritize the areas for which preventive measures should be taken.

The models are only valid for non-ionizable and non-polar substances.

It is an important precondition for the use of modelling for risk assessments that the obtained estimates are fairly realistic (but still conservative).

The main limitation of the model tool is that it is based on a number of conservative assumptions and parameters (e.g. no evaporation from fruits, no metabolization in the plant), which will not be realistic in all situations; In other words, the tool is expected to overestimate the uptake in the crops. When basing risk assessments on these estimations, assessments showing low risk - and thus no need for (further) preventive measures will be well-founded whereas the preventive measures based on assessment of high risk may actually be unnecessary.

The estimations performed and comparisons with the limited amount of available data from experimental investigations show, however, that the model tool is at least on the level with corresponding tools used in other countries with respect to the "precision" of the estimates as well as the robustness towards variations in the individual parameters. The submodels for single crops (especially the potato and the fruit tree models), which were developed and included in the tool, further increase its applicability considerably.

Based on the results of the project, the model tool is considered to be applicable for elaboration of risk assessments. Several preconditions must, however, be fulfilled:

- Human toxicological assessments – e.g. as values for acceptable daily intake (ADI) - must be available for each substance

- Investigations are conducted, which can confirm or invalidate the results of the model calculations; especially the estimate that mobile substances will be taken up from the soil and accumulated in fruits
- The applicability of the model tool is evaluated through calculations based on different scenarios in which the parameters in the databases are based on “worst case” assumptions (like now) as well as on more realistic assumptions.

Depending on the outcome of such scenario calculations, the results can be used for preparation of guidelines describing how to assess the risk in typical contamination situations – including the extent of the necessary preventive measures.



# 1 Indledning

## 1.1 Formål

Projektet har to formål:

- at redegøre for en metode eller et grundlag til beskrivelse/vurdering af sammenhængen mellem forureningsniveau af organiske forureningskomponenter i jord (og poreluft) og koncentrationer i grøntsager og frugt
- at opstille forslag til, hvordan man på grundlag af ovenstående kan udarbejde retningslinjer til anvendelse ved risikovurdering af optagelse af forureningskomponenter i grøntsager og frugt fra jordforureninger. Retningslinjerne skal kunne anvendes til design af afværgeforanstaltninger.

## 1.2 Baggrund

Miljøstyrelsen gennemførte i årene 1999-2000 undersøgelser af indholdet af PAH-forbindelser og metaller i grøntsager og frugt, dyrket i forurennet jord. Undersøgelserne var rettet mod opstilling af retningslinjer for beboere i lettere forurenede områder (Samsøe-Petersen *et al.* 2000, Samsøe-Petersen *et al.* 2002).

Det blev konkluderet, at der ved lettere forureninger (koncentrationer i jord op til "afskæringskriterierne", jf. Vejledning nr. 7, 2000, Miljøstyrelsen) kan måles uacceptabelt høje indhold af bly og tungere PAH-forbindelser (benzo(a)pyren) i grøntsager. Resultaterne peger på, at de høje indhold skyldes direkte kontakt mellem den forurenede jord og spiselige dele af grøntsagerne. Rodfrugter er specielt udsatte, men skrælning reducerer indholdet kraftigt. Transport fra rødderne til andre dele af planten vurderes ved disse forureningsniveauer ikke at have væsentlig betydning.

Miljøstyrelsen anbefaler i ovennævnte vejledning, at der i villahaver ikke bør findes lettere forurennet jord, som er frit tilgængelig. Dyrkning af grøntsager anbefales således at foregå i ren jord med en lagtykkelse på mindst 30 cm og med udlægning af markeringsnet til adskillelse af underliggende forurennet jord. Hvis man alligevel vælger at dyrke grøntsager i lettere forurennet jord, anbefales det, at grøntsagerne vaskes grundigt, og at rodfrugter skrælles. Det anbefales ligeledes, at frugt og bær vaskes grundigt.

Ud fra resultaterne af ovennævnte undersøgelse må det forventes, at direkte kontakt mellem kraftigere forurennet jord (koncentrationer over "afskæringskriterierne") og spiselige dele af grøntsager kan medføre uacceptabelt høje indhold af PAH-forbindelser og bly (og muligvis også andre metaller) i grøntsagerne. Hvorvidt koncentrationer over afskæringskriterierne i *den dybereliggende jord* – hvor jorden ikke er i direkte kontakt med de spiselige dele af planten men kun i kontakt med plantens rodnet - udgør et problem i forhold til transport fra rødderne ud til andre dele af planten eller ved fordampning, er usikkert.

Der mangler desuden viden om, hvorvidt de øvrige forureningskomponenter, der er relevante i forbindelse med jord- og grundvandsforureningsager (under Lov om forurennet jord), udgør et sundhedsmæssigt problem i forhold til optagelse i planter. De hyppigst forekommende forureningskomponenter i sådanne sager er - ud over PAH-forbindelser og metaller - klorerede opløsningsmidler og olieprodukter (benzin, diesel- og fyringsolie samt tungere olier).

### 1.3 Projektet

I de følgende kapitler gives der et overblik over de mekanismer, der er relevante for planter optagelse af organiske kemikalier. Der fokuseres på vigtige, hyppigt forekommende miljøfremmede stoffer, der forurener jord og grundvand, dvs. udvalgte benzin- og dieselforbindelser, PAH'er og klorerede opløsningsmidler. Som "repræsentanter" for disse typer forureninger er der udvalgt 8 modelstoffer:


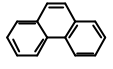
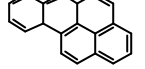
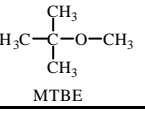
- benzen og toluen er typiske forbindelser i benzin og diesel-/fyringsolie og repræsenterer den relativt flygtige fraktion i benzin og diesel-/fyringsolie
- dodecan er udvalgt som typisk repræsentant for den tungere del i benzin og diesel-/fyringsolie
- MTBE er et stof, som anvendes i store mængder i benzin, og som samtidig er meget mobilt i jorden, hvorfor det kan nå grundvandet
- som repræsentanter for PAH'er er naphthalen og benzo(a)pyren udvalgt, idet disse to stoffer repræsenterer PAH-forbindelser med en relativt lav henholdsvis relativt høj fedtopløselighed
- som repræsentanter for klorerede opløsningsmidler er trichlorethen og tetrachlorethen (perchlor) udvalgt.

Alle disse kemikalier er ikke-elektrolytiske (neutrale) og har en moderat til høj fedtopløselighed, og følgelig har de en moderat til lav vandopløselighed, ligesom de fleste af dem er ret flygtige.

Tabel 1.1 viser egenskaber for en række typiske forureningskomponenter. De 8 stoffer, som er udpeget som modelstoffer, er angivet med et M i tabellen.

Tabel 1.1

Oversigt over de anvendte model stoffer (Rippen 2002, bortset fra *n*-dodecan (Mackay et al. 1993), benzen og enkelte data for *n*-octan (Syracuse 2002)). De udvalgte model stoffer er mærket med "M".

Struktur	Navn	log $K_{ow}$	$K_{AW}$	P	$S_w$
		$m^3/m^3$	(log $K_{AW}$ ) $m^3/m^3$	20°C Pa	20°C mg/L
	Naphthalen (NAP) <sup>M</sup>	3,36	0,0167 (-1,77)	7,2	26
	Phenanthrene (PHT)	4,46	$6,4 \cdot 10^{-4}$	0,014	1,6
	Benzo(a)pyren (BaP) <sup>M</sup>	6,13	$1,39 \cdot 10^{-5}$ (-4,9)	$7 \times 10^{-7}$	$3,4 \times 10^{-3}$
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	Benzen <sup>M</sup>	2,13	0,23 (-0,64)	12639 (25°C)	1790 (25°C)
C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>	Toluen <sup>M</sup>	2,75	0,22 (-0,6)	2900	550
C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>	m-Xylen	3,18	0,22	800	160
C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	n-Octan	5,18	103	1880 <sup>Syracuse 2002</sup>	0,66 <sup>Syracuse 2002</sup>
	Methyl tertær butyl ether <sup>M</sup> MTBE	1,14	0,0175 (-1,8)	26 800	49 000
C <sub>12</sub> H <sub>26</sub>	n-Dodecan <sup>M</sup>	5,80	307,7	16 (25°C)	0,0053
C <sub>2</sub> HCl <sub>3</sub>	Trichlorethen (=trichlorethylen) <sup>M</sup>	3,03	0,34 (-0,1)	7800	1100
C <sub>2</sub> Cl <sub>4</sub>	Perchlor (=tetrachlorethen =tetrachlorethylen) <sup>M</sup>	2,87	0,83 (-0,08)	1860	150

P: damptryk;  $S_w$ : vandopløselighed;  $K_{AW}$ : dimensionsløs Henrys lovs konstant = fordelingskoefficient luft til vand;  $K_{ow}$ : fordelingskoefficient *n*-octanol til vand.

I modelafsnittene fokuseres der på modeller eller ligninger, der kræver få data, og som ikke er særligt komplicerede, så de kan anvendes til rutinevurderinger. Komplekse, numeriske modeller, der kræver mange data er nævnt, men ikke diskuteret i detaljer.

På denne baggrund er der udvalgt et sæt af modeller, der både er realistiske og lette at anvende til estimering af optagelse i planter fra forurenede jord.





## 2 Forhold af betydning for koncentrationen af organiske stoffer i afgrøder

Planter kan udsættes for miljøfremmede, organiske stoffer fra både luften og jorden. Stoffer kan transporteres over lange afstande med luften, og der kan være tale om en betydelig eksponering af planter for sådan luftbåren forurening (atmosfærisk deposition) (Wild *et al.* 1992, Wagrowski & Hites 1997). Fra den jord, planterne vokser i, kan stoffer optages i planterne via rødderne, enten direkte fra jordpartiklerne, med vandet eller fra poreluften (Paterson *et al.* 1990, Trapp 1995). Men planterne kan også optage stoffer fra jorden via blade, skud og frugter (Bromilow & Chamberlain 1995). Dels kan flygtige stoffer fordampe fra jorden og optages af blade lige over jorden (Schroll *et al.* 1994), dels kan stoffer optages i 'overjordiske' plantedele fra jordpartikler. Når jorden er tør, kan jordstøv afsættes på planterne, og når det regner, kan der stænke betydelige mængder jord op på planterne (Trapp & Matthies 1998).

Derfor er der en række forhold, der bestemmer koncentrationen af miljøfremmede, organiske stoffer i afgrøder.

- Der er forskellige mekanismer for planter optagelse af stoffer fra omgivelserne, og stoffets egenskaber er bestemmende for, om det kan optages og - i givet fald - hvilke(n) mekanisme(r), der kan være relevante.
- Desuden er det af betydning, hvilken del af planten, der anvendes. Plantedele, der er i direkte kontakt med jorden (rodfrugter), vil være mere udsat for stofferne i jorden end plantedele, der findes over jorden (f.eks. frugter).
- Udover den rent fysiske kontakt med jorden kan det også være af betydning, hvor aktiv den del af planten, der spises, er; jo større vand- og stoftransporten gennem en given plantedel er, jo større er muligheden for transport af miljøfremmede stoffer til plantedelen. Endvidere har det vist sig, at der er store forskelle mellem de enkelte plantearter optagelse af stoffer fra jorden, ligesom eventuel transport inde i planten fra det sted, hvor stoffet er optaget, til de spiselige dele kan variere imellem arter.
- For stoffer, der optages og eventuelt transporteres i planterne, bestemmes den endelige koncentration i afgrøden desuden af, hvorvidt der sker en fortynding, fordi planten vokser, samt af om planten kan omsætte – eventuelt helt nedbryde – stoffet.

## 2.1 Mekanismer for optagelse og transport af organiske stoffer i planter

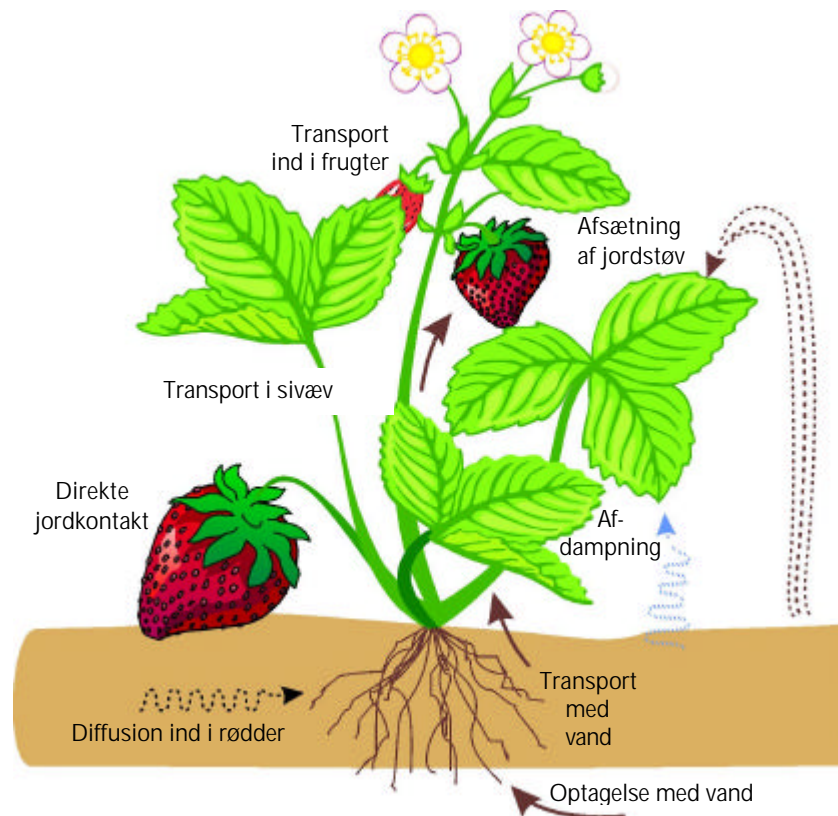
### 2.1.1 Generelt

Planter lever af/gror ved at optage vand og næringsstoffer fra jorden og kuldioxid og ilt fra luften. De er åbne over for deres omgivelser via store rod- og bladoverflader, som giver mulighed for udveksling af luftarter og væsker. Selv om planten ikke behøver de organiske, miljøfremmede stoffer kan disse principielt følge de samme transportruter som de nødvendige stoffer (ilt, kuldioxid, vand og diverse sporstoffer).

Nogle af de stoffer, der transporteres gennem jorden med vandet til rødderne, kan optages i planten og transporteres til skud, blade og frugter, hvor de kan ophobes - eventuelt indbygges i planten. Dette gælder specielt grundstoffer, f.eks. nikkel og zink (der faktisk er uundværlige for planter i små mængder; mikronæringsstoffer) samt cadmium (der ikke kan anvendes af planterne, men som alligevel optages). Også en del organiske stoffer optages og transporteres i planterne (f.eks. visse ukrudtsmidler). Andre stoffer optages stort set ikke i planten, men bliver "bremset" i de yderste lag af roden, hvor de eventuelt kan ophobes (f.eks. de større, organiske PAH-forbindelser) (Bromilow & Chamberlain 1995).

Transportmekanismerne er normalt passive, dvs. transporten sker via advektion og diffusion, og følger fysisk-kemiske love. Aktive akkumulerings- eller udelukkelsesmekanismer findes kun i meget få tilfælde. De vigtigste mekanismer er (se figur 2.1):

- optagelse med vand via rødderne
- spredning i luft- og vandporer via rødderne
- direkte jordkontakt
- transport med vand fra rod til stængel, blade og frugter (via plantens vedvæv/xylem)
- transport fra blade til frugter og rødder (via sivæv/floem)
- afdampning fra jorden til luften og deraf følgende sorption til blade eller frugter
- opslæmning af jordpartikler ved jordstænk i forbindelse med regnbyger eller vinderosion med deraf følgende deponering af jordstøv på blade eller frugter
- udveksling med den omgivende luft.



Figur 2.1  
Optagelsesmekanismer fra jord til planter (jordbær)

Transport  
ind i frugter

De to vigtigste optagelsesveje for miljøfremmede stoffer fra jorden er oftest direkte kontakt med jorden og fordampning fra jorden.

### 2.1.2 Direkte kontakt med jorden

Rodfrugter er naturligvis i kontakt med jorden, men mange planter har blade og frugter, som også kommer i direkte kontakt med jorden, f.eks. salat og jordbær. Et kemikalie kan så - ved diffusion fra jorden - komme ind i planten. Den maksimale koncentration, som kan forekomme på denne måde, er koncentrationen ved kemikalieligevægt (se afsnit 4.3.1).

Jordpartikler kan sætte sig fast på blade og frugter både ved direkte kontakt og ved jordstænk i forbindelse med regnbyger eller ved vinderosion. Jordstænk ved regnbyger er en væsentlig kilde, og plantedele helt op i 40 centimeters højde kan blive ramt af disse. Andre faktorer, som f.eks. mekanisk forrykkelse af balancen i jorden (f.eks. løsning ved pløjning osv.) eller dyrs aktivitet i jorden, kan også have betydning for den mængde jord, der sætter sig fast på bladene (Paretzke & Garland (udateret), Dreicer *et al.* 1984). Mængden af jord, der afsættes på planterne, er f.eks. målt for salat og kål (Li *et al.* 1994), og det viste sig, at der blev afsat de største mængder jord på salat. Der vil dog være forskel på salatplanter, afhængigt af, hvor lukkede salathovederne er under væksten. Salat er en lav plante (< 40 cm), og salathovedets form (roset) medfører, at partikler vaskes ind i dets indre. Et kålhoved er derimod under hele væksten mere lukket, så kun de yderste blade eksponeres for jordpartikler.

Når først kemikaliet er afsat på et blad via jordstænk eller vanddråber, er der flere muligheder for dets videre skæbne, hvoraf kun den sidste bringer det ind i planten:

- det kan fordampe
- det kan blive skyllet af sammen med jorden
- det kan nedbrydes
- det kan vandre ind i bladet

Partikler, der afsættes på planter blade, synes at kunne vandre delvis ind i det voksagtige lag (kutikula), der dækker de fleste planter blade på oversiden. En væsentlig del af partiklerne kan blive tilbage på bladene selv efter grundig vask (Kaupp 1996).

### 2.1.3 Fordampning fra jorden til blade og frugter

Når det drejer sig om flygtige forbindelser, kan spredning eller dispersion i luftfasen og deraf følgende optagelse i blade eller frugter være en væsentlig adgangsvej for kemikalier ind i planter. Ryan *et al.* (1988) konkluderede, at denne adgangsvej er specielt væsentlig for stoffer, der let fordamper fra vandig opløsning (har en høj vand-luft fordelingskoefficient,  $K_{AW}$ ). Det er måske ikke hele sandheden, da sorption til blade fra atmosfæren afhænger af forholdet mellem oktanol-vand fordelingskoefficienten ( $K_{OW}$ ) og  $K_{AW}$ . Dette forhold kaldes også oktanol-luft fordelingskoefficienten ( $K_{OA}$ ) (Trapp *et al.* 1990).

## 2.2 Plantens fysiologi

Det er derfor vigtigt at fokusere på de dele af planterne, der anvendes til konsum.

For rodfrugter er det af betydning, om den del af planten, der høstes, er en del af roden, hvorigennem der foregår aktiv optagelse og transport af vand og næringssalte til planten, eller om den blot er en "udvækst", der så at sige ligger passivt i jorden og vokser.

Gulerødder er en del af det egentlige rodnet (omend ikke den mest aktive), mens radiser er knolde (egentlig kimstængelen, der svulmer op), ligesom kartofler er stængelknolde. Det er en af grundene til, at der i de fleste undersøgelser er fundet højere indhold af miljøfremmede, organiske stoffer og metaller i gulerødder end i f.eks. radiser og kartofler (Miljøstyrelsen 1996a, 1996b, Trapp & Matthies 1998). Dertil kommer, at gulerødder har et relativt højt indhold af fedtstoffer, hvorfor der kan bindes større mængder fedtopløselige, organiske stoffer i dem end i de mere fedtfattige kartofler (Scheunert *et al.* 1994).

De mange forskellige parametres betydning for planter udsættelse for og optagelse af miljøfremmede stoffer er bl.a. belyst ved en kombination af laboratorieforsøg og modelsimuleringer (Trapp 1995). Resultaterne beskrives nedenfor og er samlet i tabel 2.1.

### *Aflejring fra luften*

Aflejring fra luften er den dominerende optagelsesvej for planter, der har en lang vækstperiode og er høje, så de spiselige dele sidder langt fra jordoverfladen. Eksempler på sådanne planter er rosenkål (der bliver stående om vinteren), nåletræer (som beholder deres nåle i adskillige år) og majs til ensilage (partikler bliver vasket indad mod indersiden af bladene).

#### *Optagelse ved fordampning fra jorden*

I almindelighed kan alle afgrøder, der vokser meget tæt på jorden, blive forurenet via denne optagelsesvej. Spredning i luften foregår hurtigt i en højde på ca. 5 cm over jordoverfladen, og luftformige dampe opløses meget hurtigt. Planter, som kan forurenes på denne måde, er f.eks. spinat, persille, salat og jordbær.

#### *Forurening af grøntsager der vokser under glas eller plast*

Det er almindeligt at dyrke grøntsager under glas eller plast (mistbænk) om foråret, både inden for kommercielt gartneri og inden for privat havebrug. I disse tilfælde kan luftarter ophobes under overdækningen, og forureningen med flygtige stoffer kan derfor blive høj.

#### *Forurening ved fastsiddende jordpartikler*

Ved kraftige regnskyl kan jordpartikler bliver sprøjtet op i 40 centimers højde. Men også bladernes form er vigtig. Hvis formen giver mulighed for, at partikler skylles ind i plantens indre (f.eks. visse typer salat), kan indholdet af fastsiddende jordpartikler være særligt højt. Men højtsiddende frugter (majs, æbler) kan også blive forurenet af jordstøv under høsten, eller hvis de falder på jorden.

Desuden kan alle rodfrugter have jord siddende på overfladen. Nogen vasker og skræller/piller omhyggeligt deres grøntsager, hvilket fjerner hovedparten af den fastsiddende jord, mens andre spiser dem uden at vaske eller skrælle dem.

#### *Transport via transpirationsstrøm*

Transport med vand, der optages fra jorden, er størst for de mere vandopløselige (polære) kemiske forbindelsers vedkommende, f.eks. MTBE og trichlorethen. Transport med vand er ikke en effektiv optagelsesvej for kemiske forbindelser med høj  $\log K_{ow}$  (langkædede alkaner, PAH), hvilket er blevet vist gentagne gange, f.eks. for 2,3,7,8-tetrachlordibenz-*p*-dioxin af McCrady *et al.* (1990). Der er imidlertid undtagelser fra denne regel. Hülster *et al.* (1994) rapporterede om transport af dioxiner og furaner i zucchini og agurk (*Cucurbita pepo*, begge tilhører samme art), og disse planter er også i stand til at optage og transportere (translokere) PAH-forbindelser (T. Delschen, personlig kommentar). Grunden til dette er blevet fastslået: disse *Cucurbitacéer* har nogle rodsafter, hvori der forekommer et protein, der binder disse fedtopløselige, organiske stoffer og gør dem vandopløselige (Neumann *et al.* 1996). Desuden har Nakajima *et al.* (1996) fundet hydroxypyren konjugater, der er mobile og har let ved at vandre, i træagtige planter. Der er hidtil blevet udført meget lidt systematisk forskning i optagelsen af organiske stoffer i planter, og det er meget sandsynligt, at der vil dukke flere overraskelser af denne art op i fremtiden.

Tabel 2.1  
 Relevante transportmekanismer sorteret efter transportmekanisme

Transportmekanisme	Relevante planter	Relevante kemikalier
Jordstænk på blade	Planter med en højde under 40 cm, f.eks. salat, jordbær, spinat	Stoffer med høj log $K_{OW}$
Transport i luftformig fase	Planter med en højde under 5 cm, f.eks. jordbær	Kun flygtige og halvflygtige stoffer
Transport i vedvæv	Alle planter, for transport til blade	Polære kemikalier (log $K_{OW}$ < 3,5), og relativt mere væsentlig for stoffer med lavt damptryk
Transport i sivæv	Alle planter, for transport til frugter	Polære stoffer og svage syrer
Aflejring fra luften	Blade på planter, der står i lang tid (grønkål, rosenkål, majs)	Især stoffer med høj log $K_{OW}$

### 2.3 Betydningen af plantens vækst og omsætning af stofferne i planten

Plantens vandtransport og vækst har også betydning for opkoncentreringen. Jo større vandmængde, der optages fra jorden, jo mere opløst stof vil komme i kontakt med rødderne. Ved væksten sker der en fortynding af stofferne i planten, hvilket vil nedsætte koncentrationerne (Paterson *et al.* 1990, Trapp 1995). Disse forhold er medvirkende til observerede variationer i koncentrationer af forureningskomponenter, der kan findes i samme afgrøde (Voutsas *et al.* 1996). Endvidere kan nogle stoffer nedbrydes – eller omdannes til andre stoffer – i planter, hvilket også vil nedsætte koncentrationen af det oprindelige stof i afgrøderne.

#### 2.3.1 Vækst

Planters vækst har to funktioner i forbindelse med optagelse af stoffer fra jorden. For det første kan roden vokse ind i en forurenede del af jorden og dermed åbne mulighed for optagelse af miljøfremmede stoffer, og for det andet fortynder væksten de forbindelser, som allerede er blevet optaget. Dette forhold mellem optagelse og fortynding ved vækst kan for tykke rødders vedkommende (grøntsager) reducere koncentrationen af fedtopløselige forbindelser væsentligt (se f.eks. 'gulerodsmodellen' i afsnit 4.4.12).

#### 2.3.2 Omsætning

Planter har i sammenligning med andre livsformer det største kromosomsæt, der for nogle arter overstiger  $10^{11}$  basepar (bakterier har <  $10^8$ ) (Voet *et al.* 1998). Dette svarer til planters meget komplekse sekundære stofskifte. Der kendes i dag mere end 80.000 sekundære stofskifteprodukter, og der findes endnu flere, som endnu ikke er identificeret (Richter 1998). Dybest set minder planters stofskifte mere om reaktioner i en dyreliver end om bakteriell omsætning (Sandermann 1994). Cytochrom P-450 monooxygenaser og glutathion-S-transferaser (GST) synes at være de vigtigste enzymtyper til afgiftning af miljøfremmede stoffer som f.eks. ukrudtsmidler (Pflugmacher & Schröder 1995, Barret 1995). P-450 enzymer katalyserer fase I omdannelsesreaktioner, ofte ved hydroxylering men også ved sulfoxidering og N- og O-dealkylering. GST står for fase II konjugationsreaktioner, som spiller

en central rolle i forbindelse med afgiftning af ukrudtsmidler i planter. Til forskel fra dyr kan planter ikke udskille de dannede stofskifteprodukter via urinen. I stedet indebærer fase III af planternes "håndtering" af miljøfremmede stoffer en oplagring og sektionsinddeling af opløselige stofskifteprodukter i vakuoler/saftrum og af uopløselige stofskifteprodukter i cellevægge (Komossa *et al.* 1995). Dette kan føre til de såkaldte 'bundne rester' ('bound residues'), der måles i forsøg med radioaktivt mærkede stoffer.

Omdannelsen af miljøfremmede stoffer kan både forekomme uden for planten i rodzonen (rhizosfæren), inde i planten og mens stoffet er sorberet på bladets overflade (ved fotolyse). Ofte er det ikke muligt at skelne mellem den nedbrydning/omsætning, der sker ved hjælp af svampe eller bakterier, som lever på og i planterne, og den omsætning, der sker ved hjælp af plantens egne enzymer. Nogle reaktioner er imidlertid mere almindelige i højerestående planter end i bakterier, f.eks. iltning af trichlorethen (Newman *et al.* 1997).

Omsætningen i planten og fotolyse af en kemisk forbindelse kan medtages i planteoptagsmodeller, f.eks. ved at antage en halveringstid i planten eller *Michaelis-Menten* kinetik. Men manglen på realistiske *in-vivo* data for plantestofskifte begrænser mulighederne for at medtage omsætning af kemiske stoffer inde i planter.

For de modelstoffer, der indgår i projektet, er de kendte omsætningsprocesser i planter samlet i tabel 2.2.

Tabel 2.2  
Data for omsætning af relevante kemiske forbindelser i/ved hjælp af planter

Kemisk forbindelse	I cellesuspension	<i>in-vivo</i>	Reference
Naphthalen	ingen data	ingen data	-
Benzo(a)pyren	ja	ingen data	Komossa et al. (1995)
MTBE	ingen data	ingen data	Trapp et al. (2002)
Benzen		ja (langsom)	Trapp (2002a)
Toluen		ja, nogle planter	Cornejo et al. (1999)
<i>n</i> -dodecan	ingen data	ingen data	-
Trichlorethen	ja	ja	Newman et al. (1997)
Tetrachlorethen		ja (ret stabil i planter)	Trapp (2002a)

Det fremgår af tabel 2.2, at den tilgængelige viden om stoffernes omsætning i planter er meget begrænset, og at der ikke foreligger data til en kvantitativ beskrivelse af den. Derfor vil parameteren for omsætning/nedbrydning i planten i de senere modelberegninger blive sat til nul – selvom dette i nogle tilfælde vil betyde, at de beregnede koncentrationer i planterne vil være højere, end det egentlig er realistisk at forvente.





## 3 Tilgængelighed i jorden

### 3.1 Forsøg i vand

Mange af de forsøg, der er gennemført til undersøgelse af planters optagelse, transport og eventuelle ophobning af miljøfremmede stoffer, er udført i opstillinger, hvor stoffet er tilsat vand, som planten vokser i. Sådanne metoder giver de bedste muligheder for at undersøge enkeltelementer i optagelses- og transportprocesserne, men manglen på jord gør dem forskellige fra de forhold, afgrøder i praksis vokser under. Det har nemlig vist sig, at næsten alle stoffer bindes i jord, og derfor vil forsøg udført i jord give helt andre (lavere) resultater med hensyn til koncentrationer i planter end forsøg i vand.

### 3.2 Forholdene i jord

Jord består grundlæggende af en blanding af sand- og lerpartikler og organisk materiale (humus). Ikke alene forholdet mellem dem men også oprindelsen af både sand, ler og humus har stor betydning for jordens egenskaber (Chung & Alexander 2002); f.eks. har oprindelsen af sand og ler betydning for kalkindholdet. Miljøfremmede, organiske stoffer bindes til lerpartikler og humus, og forhold som jordens pH (reaktionsevne) og - i nogle tilfælde - dens ionbindingsevne (ionbytningskapacitet) er også af betydning for, om stofferne er tilgængelige for planter (Bromilow & Chamberlain 1995).

### 3.3 Ældning og tilgængelighed

Dertil kommer, at de omtalte bindingsmekanismer ændres med tiden, så der ofte sker det, at jo længere tid et stof er i jorden, des fastere bliver det bundet (Alexander 1995, Reid *et al.* 2000). I nogle tilfælde bliver bindingerne så stærke, at man ikke en gang kan få stofferne "frigjort" med stærke opløsningsmidler. Derfor kan man ikke umiddelbart beregne hvor høj en koncentration i planter, en målt koncentration af et stof i jorden vil føre til.

De miljøfremmede, organiske stoffer i jorde med ældre forureninger har som oftest ligget i jorden i en årrække, og de ikke-bundne stoffraktioner er stort set nedbrudt eller udvasket, mens den tilbageværende del kan være indbygget i jordens humus- og mineralstruktur. Der er derfor grund til at antage, at de kun vil blive optaget i planter i begrænset omfang.

Det skal dog bemærkes, at planternes rødder påvirker de fysisk-kemiske forhold i rodzonen på flere måder. Røddernes vækst i jorden gør den mere porøs, hvorved den iltes og vandtransporten ændres, ligesom der udskilles stoffer fra rødderne, som vides at kunne påvirke opløseligheden af både uorganiske og organiske forbindelser (Nardi *et al.* 1997). Disse forhold giver bl.a. betingelser for øget mikrobiel aktivitet i rodzonen, og det er påvist, at de kan have betydning - både positiv og negativ - for tilgængeligheden af miljøfremmede og andre stoffer i jorden (Del Castilho & Chardon 1995, Hamon *et al.* 1995).

På arealer, hvor jordbundsforholdene gør bindingen af stofferne minimal, er det sandsynligt, at en større del af stofferne er blevet udvasket af nedsvivende

regnvand gennem årene, end på arealer, hvor bindingen er kraftigere. De miljøfremmede, organiske stoffer og metaller, der findes i jorden (og som måles ved de kemiske analyser) er derfor ikke nødvendigvis lettere tilgængelige i jord med lavt indhold af organisk stof og ler/silt samt lav kationbytningssevne end i jord, hvor stofferne hele tiden har været bundet stærkere. For ældre forureninger kan det derfor ikke umiddelbart antages, at jordbundsforholdene er mere betydende for tilgængeligheden af de miljøfremmede stoffer end de ændringer af forholdene i rodzonen, planterødderne kan forårsage.

### 3.4 Model lernes grundlag

De eksisterende modeller er i vidt omfang baseret på resultater fra forsøg i vandig opløsning samt på forsøg, hvor stofferne har været tilsat jord umiddelbart før forsøgets start. Betydningen af indholdet af organisk stof for tilgængeligheden af miljøfremmede stoffer indgår derfor i modellerne, men betydningen af ældning for tilgængeligheden af stofferne er ikke medtaget i modellerne.

### 3.5 Transport i jorden

Tidligere undersøgelser (Samsøe-Petersen *et al.* 2000 og 2002) har belyst tilgængeligheden i "gammel" forurenede jord af mindre mobile stoffer som bly og benzo(a)pyren og dannet grundlaget for den gældende vejledning (Vejledning nr. 7, 2000, Miljøstyrelsen), hvor der anbefales dækning af lettere forurenede jord med et mindst 30 cm tykt lag ren jord. Herved undgås direkte kontakt mellem de spiselige dele af planterne og jorden og dermed risiko for forurening med stoffer, der ikke er mobile.

Planternes rodnet kan dog i de fleste tilfælde gå dybere end 30 cm, og derfor kan det ikke udelukkes, at rødderne kan komme i kontakt med vandopløselige stoffer (som MTBE) og flygtige stoffer (som toluen), der kan fordampe til de øvre jordlag og til luften ovenover.

Derfor koncentrerer dette projekt om vurdering af sådanne stoffers tilgængelighed i jorden og optagelighed i planterne. Datagrundlaget for netop disse stoffer er begrænset, hvorfor resultater fra undersøgelser af mindre mobile stoffer bruges til belysning af mekanismer, der må formodes at gælde alle stofgrupper.

### 3.6 Mål for tilgængelighed

Der er gennemført mange forsøg til belysning af tilgængeligheden af både metaller og organiske stoffer i forurenede jord, og der er adskillige forslag til kvantificering af betydningen af ældning og/eller til ekstraktionsmetoder, der kan anvendes til kemiske analyser, som skulle give et realistisk billede af, hvor stor en del af stofferne, der er tilgængelig for levende organismer.

Ved Cornell University i USA er der gennemført en lang række forsøg med ældning af forskellige organiske stoffer i jord (f.eks. Kelsey & Alexander 1997). Hovedformålet er at finde en ekstraktionsmetode til kemiske analyser, der giver et mål for biotilgængeligheden af organiske stoffer i jord.

Typisk tilsættes stoffet til steriliseret jord, hvorefter denne fugtes og anbringes ved 20-22°C i forskellige perioder (op til 200 dage). Derefter undersøges stoffets tilgængelighed ved hjælp af forskellige ekstraktionsmetoder (organiske opløsningsmidler, f.eks. tetrahydrofuran og lipidlignende membraner (Tang *et*

al. 2002)). Til sammenligning anvendes kraftig ekstraktion (Soxleth ekstraktion med methylen chlorid), der forventes at udtrække "alt" tilstedeværende stof fra jorden. I flere af undersøgelserne er der også anvendt levende organismer til sammenligning med de kemiske ekstraktionsmetoder. De to foretrukne organismer er kompostorm (*Eisenia foetida*) (Kelsey *et al.* 1997, Kelsey & Alexander 1997, Tang *et al.* 1998, Tang *et al.* 2002) og mikroorganismer, hvor målinger af mikrobiel nedbrydning af stofferne anvendes som måleparameter (Kelsey *et al.* 1997, Kelsey & Alexander 1997, Tang & Alexander 1999, Chung & Alexander 1998). I en enkelt undersøgelse har man også anvendt planter (Tang *et al.* 1998).

Alle forsøgene viste nedsat tilgængelighed af stofferne med øget ældningstid, men størrelsen af nedsættelsen varierede med de enkelte stoffer og de organismer, der blev brugt. Tang *et al.* (1998) undersøgte optagelsen af anthracen i hvede- og bygspirer samt i kompostorme. Optagelsen af anthracen fra jorden faldt med stigende inkuberingsstid (0 til 203 dage). Forholdet mellem BCF-værdien på tidspunktet for spiking og efter 203 dages ældning var 1,7; 1,4 og 1,9 for henholdsvis hvede, byg og orme.

Groom *et al.* (2002) har gennemført pottforsøg til undersøgelse af planteoptagelsen af sprængstoffer fra et canadisk skydefelt. De sammenlignede med modelberegninger ifølge Briggs *et al.* (1982) (ligning 21), hvor tilgængeligheden af stofferne blev beregnet ud fra stoffernes jord-vand fordelingskoefficient. Kun for en enkelt art (alm. rajgræs) var der overensstemmelse mellem beregnet og målt koncentration i planterne. For de øvrige plantearter overvurderede modelberegningerne tilgængeligheden, idet forholdet mellem beregnede og målte koncentrationer var mellem 1 og 6.

Der blev desuden indsamlet prøver af en række naturligt forekommende plantearter på stedet. Når variationen mellem arter tages i betragtning, var niveauet, der blev fundet i vilde planter, af samme størrelse som det, der blev fundet i afgrøderne i pottforsøget (Groom *et al.* 2002).

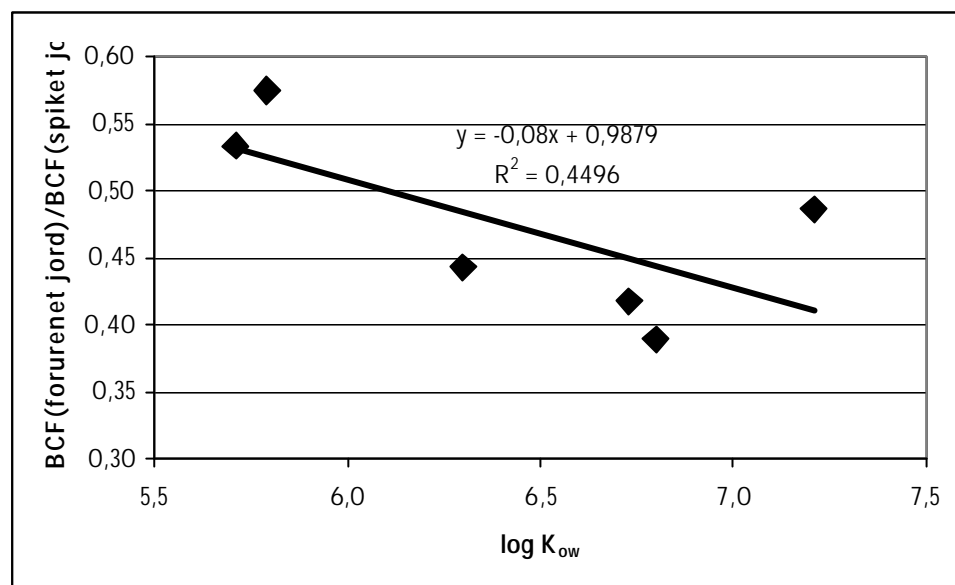
Scribner *et al.* (1992) gennemførte en serie forsøg, hvor jord fra en majsmark, der havde været sprøjtet med simazin hvert år i 20 år, blev sammenlignet med jord, der blev spiket med stoffet i laboratoriet. I marken blev der udtaget prøver gennem en vækstsæson startende før årets første behandling med simazin, hvor den forekommende simazin altså var mindst 1 år gammel.

Fordelingskoefficienten mellem organisk kulstof i jorden og vand ( $K_{oc}$ ) blev bestemt for nyspiket jord og for jord fra majsmarken. Den var ca. 15 gange højere i jord fra majsmarken, hvor stoffet altså var hårdest bundet.

Desuden blev der udført pottforsøg, hvor effekter af simazin på sukkerroer blev målt. Ved samme koncentration (0,22 mg/kg) blev halvdelen af planterne skadede af nyspiket simazin, mens der ikke var nogen skader i jord fra majsmarken med den ældede simazin.

Gennem ca. 10 år har Delschen og en gruppe forskere (LUA Landesumweltamt Nordrhein-Westfalen, Soil Protection) udført studier af planteoptaget fra forurenede jord af en lang række  $^{14}\text{C}$ -mærkede PAH- og PCB-forbindelser. Data herfra er publiceret af Delschen *et al.* (1996, 1999). Deriblandt er BCF bestemt for en række PCB-forbindelser (PCB 28, PCB 52, PCB 101, PCB 138, PCB 153 og PCB 180) i kartofler og gulerødder for både spiket og forurenede jord. Forholdet mellem BCF(spiket jord) og

BCF (forurennet jord) antages at være et udtryk for reduktionen i biotilgængeligheden (for planteoptag). Gennemsnittet af dette forhold for rodfrugter varierer mellem ca. 1,8 og 2,6, hvilket viser, at der er sket en reduktion i tilgængeligheden. Desuden er der fundet en korrelationskoefficient mellem dette forhold og stoffernes  $\log K_{ow}$  på  $-0,7$ , hvilket indikerer, at reduktionen i biotilgængeligheden øges med voksende hydrofobicitet af stoffet. Figur 3.1 illustrerer disse forhold.



Figur 3.1  
Forholdet mellem BCF (forurennet jord) og BCF (spiket jord) som funktion af  $\log K_{ow}$ . Kun målinger for PCB-forbindelser indgår. Data fra Delschen et al. (1996).

Carmichael *et al.* (1997) gennemførte desorptionsforsøg med jord, der dels var spiket med phenanthren og chrysen, dels stammede fra to PAH-forurenede grunde, der var blevet forurenede i perioden 1890-1950.

Desorptionsforsøgene viste, at der var en faktor 200-2000 (henholdsvis chrysen og phenanthren) forskel på desorptionen fra spiket og forurennet jord. Den maksimale desorption fra den forurenede jord var ca. 0,30%, mens den tilsvarende værdi for spiket jord var 2,5-12%.

I tabel 3.1 er oplysninger fra disse undersøgelser samlet.

Tabel 3.1

Tilgængelighed af organiske stoffer i forurenede jord sammenholdt med beregnede værdier (Groom et al. 2002) eller værdier for nyspikede jord

Undersøgelse	Alder af forurening	Parameter	Forhold eksp./beregnet tilgængelighed spiket/ældet	Reference
Planteoptag HMX	?-nylig	Plantekonc.	1-6	Groom et al. 2002
Desorption simazin	1-20 år	$K_{oc}$	16	Scribner et al. 1992
Desorption PAH'er	>40 år	Desorptions-hastighed	227-2630	Carmichael et al. 1997
Planteoptag PAH'er	203 dage	BCF	1,4-1,7	Tang et al. 1998
Ormeoptag PAH'er	203 dage	BCF	1,9	Tang et al. 1998
Planteoptag PCB'er	?	BCF	1,8-2,6	Delschen et al. 1996

Resultaterne i tabel 3.1 viser, at der er meget store forskelle på, hvor meget tilgængeligheden af de forskellige stoffer er reduceret i de forskellige undersøgelser. Det er påfaldende, at den undersøgelse, hvor den største reduktion er fundet, er den, hvor forureningen har ligget længst i jorden, mens de undersøgelser, hvor ældningen har været mindre end et år, er dem, hvor tilgængeligheden er reduceret mindst.

I en oversigtsartikel diskuterer Reid *et al.* (2000) mulighederne for at finde en ekstraktionsmetode, der gør det muligt at ekstrahere den biotilgængelige del af organiske stoffer fra jordprøver. Bl.a. gennemgås flere af studierne fra Cornell University.

Reid *et al.* påviser, at der er store forskelle på tilgængeligheden af stoffer i jorden for de to mest anvendte organismegrupper (mikroorganismer og orme). De understreger endvidere, at selvom mange forfattere har fundet god sammenhæng (høje korrelationskoefficienter) ved regressionsanalyse af ekstraktions- og optagelsesdata, så er der ikke tale om et forhold på 1:1 mellem det ekstraherede og det biotilgængelige – der er kun tale om, at det målte *relative* fald i tilgængelighed er tæt på det samme for de to metoder.

På baggrund af disse sammenligninger, konkluderer Reid *et al.* (2000):

- Der vil ikke være én ekstraktionsmetode, der vil være dækkende for tilgængeligheden for alle organismer.
- Man kan ikke bruge nogen kendt ekstraktionsmetode til at vurdere den tilgængelige fraktion direkte.

### 3.7 Sammendrag og konklusion

Forskellige studier af betydningen af ældning på biotilgængeligheden er gennemgået.

Biotilgængeligheden kan ikke defineres entydigt, da denne er betinget af, hvordan den måles. Måles biotilgængeligheden af et kemikalie således på

optagelse i orme, er der tale om en sum af flere optagelsesveje, f.eks. via indtagelse af jord, indtagelse af jordens porevand, optagelse via hudkontakt og indtagelse af dødt plantemateriale indeholdende kemikaliet. Måles biotilgængeligheden som den mængde kemikalie, der kan udvaskes, er den et udtryk for den fraktion af kemikaliet, som forefindes i jordens porevand og som er bundet til suspenderet og opløst materiale, medens biotilgængeligheden af kemikaliet målt ved planteoptag er en funktion af mængden af stof, som forefindes i jordens porevand og -luft, samt den mængde kemikalie, som binder sig til det opløste organiske materiale i jorden, der nemt optages af planter.

Eksperimentelle studier af reduktionen af biotilgængeligheden ved planteoptag tyder på, at biotilgængeligheden bliver reduceret med en faktor mellem 1,4 og op til ca. 2,6 ved ældning. Resultaterne af de eksperimentelle studier tyder endvidere på, at reduktionen øges med stoffets fedtopløselighed. I det videre arbejde antages det generelt, at biotilgængeligheden for planteoptag via rødder reduceres med en faktor 2 ved ældning. Dette kan muligvis føre til, at der regnes med en for lav biotilgængelighed for de mere vandopløselige stoffer og med en for høj biotilgængelighed for de fedtopløselige stoffer.

# 4 Modeller til beskrivelse af optagelse fra jord og transport i planter

Som beskrevet i kapitel 2 kan optaget i planter af forureningskomponenter i jorden ske via flere eksponeringsveje, der hver især er betinget af flere trin:

## I. Optag fra jorden

- Fordeling af stofferne i jordens tre faser: luft, vand og fast matrice ved sorption/desorption og fordampning/kondensation.
- Diffusiv transport af komponenterne i jordens porevand og -luft til planterødderne
- Diffusion ind i de 'underjordiske' dele af planten (rødder, stængel)
- Passiv transport ind i rødderne med transpirationsvandet

## II. Optag fra luften via fordampning fra jorden

- Transport af stoffet til det øverste jordlag i jordens luft- og vandfase
- Fordampning af stof fra det øverste jordlag og videre transport i luftlaget
- Diffusivt optag fra luften og ind i bladene

## III. Optag fra jordpartikler, der bliver sprøjtet/hvirvlet op på afgrøderne

- Frigivelse af bundet stof i de jordpartikler, der er på afgrøderne, til vand- og luftfasen uden for planten
- Diffusiv transport af det opløste og fordampede stof ind i bladene

Når først stoffet er kommet ind i planten, vil det kunne blive transporteret rundt i planten (translokation):

- Translokation fra rødderne til bladene via vedvæv
- Translokation fra bladene til frugterne via vedvæv og sivæv
- Translokation fra bladene tilbage til rødderne via sivæv

Endelig vil koncentrationen i planterne kunne mindskes ved

- Plantevækst
- Omsætning af stofferne

I det følgende vil de modeller og principper, der kan anvendes til beregning af de ovennævnte processer, blive beskrevet.

### 4.1 Fordeling i jorden

De fleste modeller for planteoptag er relateret til stoffets koncentration i jordens porevand, men udgangspunktet er ofte en kendt koncentration i

jorden, hvorfor den reelle fordeling af stoffet mellem jordens tre faser (luft, vand og fast matrice) skal estimeres.

Til beregningerne antages det ofte, at der er ligevægt mellem de tre faser. Imidlertid kan der ikke være tale om en reel ligevægt, da ældning er påvist at have indflydelse på tilgængeligheden. De fleste sorptionsdata viser en 2-trins proces, før ligevægten er opnået, med en første hurtig sorption, som typisk sker inden for de første timer. Denne sorption udgør 20-50% af den totale sorption. Den hurtige sorption efterfølges af væsentligt langsommere sorption, som bl.a. består af diffusion af stoffet fra overfladen længere ind i jordpartiklerne samt indarbejdning af stoffet i f.eks. humusmaterialet. Den sidste del af sorptionsprocesserne kan forløbe gennem flere år, og det er den, der nedsætter stoffernes tilgængelighed mest.

#### 4.1.1 Beregning af koncentrationen i jordens poreluft og -vand

For fedtopløselige (lipofile) stoffer vil den største fraktion af stoffet være bundet til jorden. Denne binding beskrives ved jord-vand fordelingskoefficienten ( $K_D$ ) (L/kg):

$$K_D = C_M / C_S \quad \text{Ligning 1}$$

hvor

$C_M$  er stoffets koncentration i den faste matrice (mg/kg)

$C_S$  er stoffets koncentration i jordens porevand (mg/L)

Jord-vand fordelingskoefficienten ( $K_D$ ) kan for fedtopløselige, organiske stoffer estimeres fra:

$$K_D = f_{OC} \cdot K_{OC} \quad \text{Ligning 2}$$

hvor

$f_{OC}$  er indholdet af organisk kulstof i jorden (kg/kg)

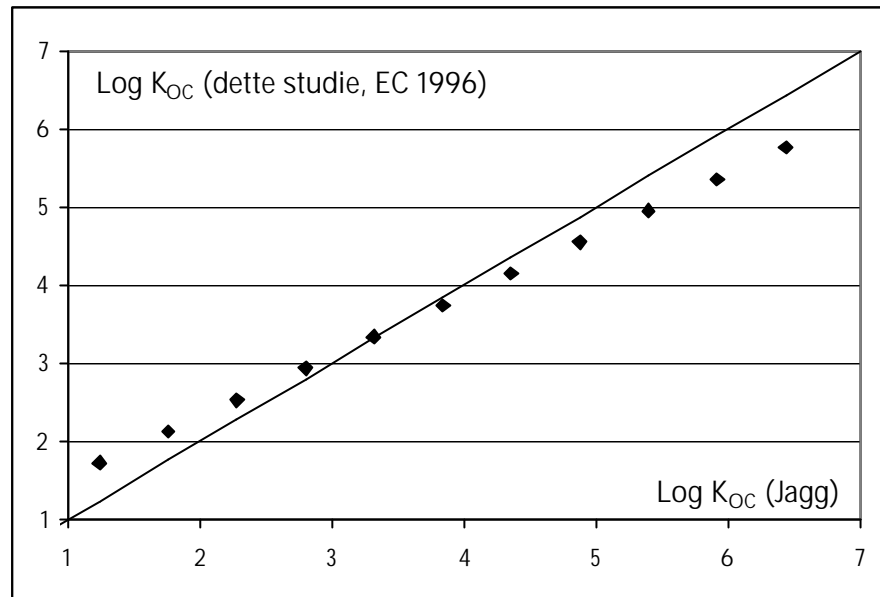
$K_{OC}$  er fordelingskoefficienten mellem organisk kulstof og vand (L/kg)

En lang række korrelationer er formuleret til beregning af  $K_{OC}$  fra  $K_{OW}$ , f.eks. følgende korrelation for fedtopløselige stoffer (EC 1996):

$$\log K_{OC} = 0,81 \log K_{OW} + 0,1 \quad \text{Ligning 3}$$

Denne korrelation (ligning 3) er ikke den samme, som den der anvendes i Jagg-modellen (Miljøstyrelsen 1998). Som det fremgår af figur 4.1, er forskellen på den beregnede  $\log K_{OC}$  ved anvendelse af de to modeller imidlertid ikke stor. Ved de mindre fedtopløselige stoffer vil ligning 3 resultere i lidt højere  $\log K_{OC}$ , end anvendelse af udtrykket i Jagg-modellen vil resultere i. Dette medfører, at ligning 3 giver en lavere, beregnet biotilgængelighed end Jagg-modellen ved de mindre fedtopløselige stoffer. Det modsatte gør sig gældende for de mere fedtopløselige stoffer, hvor biotilgængeligheden vil blive skønnet højere ved anvendelse af ligning 3 end ved anvendelse af Jagg-modellen.





Figur 4.1  
Sammenligning af beregnede  $\log K_{OC}$  ved anvendelse af udtrykket i Jagg-modellen og nærværende studie

Ovenstående korrelation (ligning 2) til estimering af  $K_D$  gælder kun for "reversibel" sorption. Imidlertid er desorption fra jordmatrixen tilsyneladende ikke altid fuldt reversibel, fordi en del af det bundne stof ikke nødvendigvis desorberes under naturlige omstændigheder. Den begrænsede desorption gør sig gældende især efter en vis tid (ældning) (se kapitel 3).

Kun den del af stoffet, der befinder sig enten i jordens porevand eller -luft, anses for at være let biotilgængelig.

Oftest er udgangspunktet en kendt totalconcentration i jorden ( $C_T$ ). Koncentrationen i jordens porevand ( $C_S$ ) og poreluft ( $C_L$ ) kan beregnes af :

$$\frac{C_S}{C_T} = \frac{1}{K_D + V_V/d' + K_{AW} \cdot V_L/d'} \quad \text{Ligning 4}$$

$$\frac{C_L}{C_T} = \frac{K_{AW}}{K_D + V_V/d' + K_{AW} \cdot V_L/d'} \quad \text{Ligning 5}$$

hvor

$C_T$  er stoffets koncentration i jorden (mg/kg våd jord)

$V_V$  er vandindholdet i jorden (L/L jord)

$V_L$  er luftindholdet i jorden (L/L jord)

$d'$  er jordens "bulkdensitet" (kg/L tør jord)

$K_{AW}$  er luft-vand fordelingskoefficienten (L/L) og er lig med den såkaldte dimensionsløse Henrys lov konstant:  $K_{AW} = H/(R \cdot T)$

$T$  er den absolutte temperatur

$R$  er gaskonstanten

Hvis den herved beregnede  $C_S$  overstiger stoffets vandopløselighed, er der en fri fase af stoffet i jorden. Hvis dette er tilfældet, gælder ovennævnte formler

ikke, og her sættes stoffets koncentration i jordens porevand lig med stoffets vandopløselighed og stoffets koncentration i poreluften til  $K_{AW} \cdot S_w$ , hvor  $S_w$  er stoffets vandopløselighed.

Tilsvarende kan  $C_s$  og  $C_T$  beregnes, hvis  $C_L$  er kendt:

$$C_s = C_L / K_{AW} \quad \text{Ligning 6}$$

$$C_T = \frac{K_D + V_V/d' + K_{AW} \cdot V_L/d'}{K_{AW}} \cdot C_L \quad \text{Ligning 7}$$

Forholdet mellem den samlede mængde stof i jordens poreluft ( $m_L$ ) og i jordens porevand ( $m_V$ ) kan således estimeres fra:

$$\frac{m_L}{m_V} = \frac{K_{AW} \cdot V_L}{V_V} \quad \text{Ligning 8}$$

#### 4.1.2 Modeller til simulering af ældning

Der er opstillet en længere række af modeller til beskrivelse af ældningsprocessen (f.eks. Wu & Gschwend 1986, Pignatello & Xing 1996, Xing & Pignatello 1997). Ofte opdeles sorptionsprocessen i to trin: en første meget hurtig sorption, som udgør ca. 20-50% af den samlede sorption, samt af en sorption med en væsentligt langsommere desorptions-hastighed. Modellering af kinetikken for sorption/desorption foretages således ofte ved en to-box model, hvor den ene box (typisk overfladen af jordpartiklerne) redegør for den hurtige sorption/desorption, og den anden box (den indre del af jordpartiklerne) redegør for den langsommere proces, hvori bl.a. den diffusive transport mellem partiklernes overflade og indre indgår.

På basis af målinger af sorption/desorptionen af simazin i jord dyrket med majs, fandt Scribner *et al.* (1992), at jord-vand fordelingskoefficienten for en 20 år ældet jord var på ca. 23-26 L/kg, og for en markjord, lige efter spikning med simazin, ca. 1,5-1,6 L/kg, dvs. fordelingskoefficienten var ca. 15 gange højere for en ældet jord end for en jord lige efter spikning med simazin.

Brusseau & Rao (1989) har fundet udtryk for sorptionsraten ( $k_{sorp}$  (timer<sup>-1</sup>)) for den langsomme del af sorptionen. Den blev for hydrofobe, organiske forbindelser fundet at variere med den "sande" jord-vand ligevægtskoefficient for stoffet i jorden  $K_D(\infty)$  (dvs. den jord-vand fordelingskoefficient, der kan måles efter "uendeligt" lang tid):

$$\log k_{sorp} = 0,301 - 0,668 \cdot \log K_D(\infty) \quad \text{Ligning 9}$$

Ved anvendelse af denne korrelation kan det beregnes, at den tid, det tager at nå ca. 95% af ligevægten er 8½ år for et stof med en  $K_D(\infty)$  på ca. 500 L/kg og ca. 27 år for et stof med en  $K_D(\infty)$  på 1000 L/kg. Anvendes de tidligere refererede jord-vand fordelingskoefficienter på 23-26 for simazin, kan det beregnes, at det vil tage ca. 22 dage at nå 95% af ligevægten og ca. 34 dage at nå 99% af ligevægten. Til sammenligning kan det nævnes, at i de ovennævnte studier (Scribner *et al.* 1992) blev det fundet, at efter ca. 30 dage var koncentrationen i jordens porevand 2% af den koncentration, der ville

forventes ud fra ligevægtsmålinger af frisk-spiket jord. I dette tilfælde synes Brusseau & Raos (1989) estimat (ligning 9) altså at være realistisk.

Da modellering af ældningsprocessen er meget kompliceret og kræver en større mængde data vedrørende jorden og forureningen (deriblandt forureningens alder), er det imidlertid i dette projekt valgt ikke at medtage en kompliceret modelbeskrivelse af denne proces i modelværktøjet. I stedet antages det pragmatisk (jf. kapitel 3), at tilgængeligheden for planteoptag mindskes med en faktor 2 ved ældning. Dette vurderes generelt at være et konservativt estimat for de gængse kemikalier, der findes i forurenede grunde af lidt ældre dato.

## 4.2 Transport i jorden

Transport af stofferne hen til planten kan ske ved diffusiv transport i jordens poreluft og -vand, samt ved advektiv transport.

### 4.2.1 Transporthastighed gennem jorden

Bortset fra de store PAH-forbindelser (med flere ringe) har alle de betragtede stoffer (naphthalen, benzen, toluen, dodecan, trichlorethen, tetrachlorethen) en luft-vand fordelingskoefficient  $K_{AW} > 10^{-4}$  (tabel 1.1). Stofferne vil derfor diffundere både i jordens poreluft og -vand.

Generelt er diffusionskoefficienten i luftfasen ca.  $10^{-5}$  m<sup>2</sup>/s og i vandfasen ca.  $10^{-9}$  m<sup>2</sup>/s. Antages  $V_L$  lig med 0,1 og  $V_V$  lig med 0,3, kan det beregnes, at diffusionen i poreluften har stort set samme betydning som diffusionen i vandfasen for stoffer med en  $K_{AW} > 3 \cdot 10^{-4}$ .

Følgende anden ordens differentiaalligning beskriver transporten af stoffer i jorden via diffusion i både jordens porevand og -luft samt via advektion, når den effektive diffusionskoefficient og den advektive hastighed kan antages konstante:

$$\frac{\partial C_T}{\partial t} + \mu \cdot C_T = D_E \cdot Z^2 \cdot \frac{\partial^2 C_T}{\partial Z^2} - V_E \cdot \frac{\partial C_T}{\partial Z} \quad \text{Ligning 10}$$

hvor

$C_T$  er den totale koncentration i jorden (mg/kg)

$\mu$  er nedbrydningshastigheden for stoffet i jorden (d<sup>-1</sup>). Denne sættes her til nul

$D_E$  er den effektive diffusionskoefficient i jorden (m<sup>2</sup>/d), hvor der er taget højde for diffusionen i både jordens luft- og vandfase. Se bilag G for beregning af denne

$V_E$  er transporthastigheden med vandet i jorden (m/d). Se bilag G for beregning af denne

Afdampningen til atmosfæren er antaget at ske via diffusion af stofferne gennem et stillestående luftlag med en tykkelse  $\delta_{luft}$  (m). Jury *et al.* (1990) har angivet en analytisk løsning til denne differentiaalligning med følgende grænsebetingelser:

- koncentrationen i det øverste lag af en tykkelse  $X$  er nul
- koncentrationen i et lag mellem  $X$  og  $X+\Delta X$  er  $C_0$
- koncentrationen i dybder over  $X+\Delta X$  er nul

Løsningen er gengivet i bilag G. Grænsebetingelserne svarer til, at der er lagt et lag ren muldjord med en tykkelse  $X$  m over en forurening, der befinder sig i dybden  $X+\Delta X$  m. Der anvendes i beregningerne et 0,5 m tykt dæklag (hvilket man som minimum må forvente vil blive udskiftet ved en afværgeforanstaltning) over et forurenede lag jord af en tykkelse på  $\Delta X$ .

Opblandingsdybden  $\delta_{\text{luft}}$  blev af Jury *et al.* (1990) sat til 0,005 m.

I Jagg-modellen, der er udviklet som beslutningsstøtteværktøj i forbindelse med oprydning af forurenede grunde (Miljøstyrelsen 1998) beregnes transporthastigheden op gennem jorden ( $J$  ( $\text{mg}/\text{m}^2/\text{d}$ )) ved anvendelse af Ficks lov:

$$J = -N \cdot D_L \cdot \frac{C_{L,\text{Baggrund}} - C_L}{X} \quad \text{Ligning 11}$$

hvor

- $X$  er dybden i jorden svarende til poreluftkoncentrationen  $C_A$  (m), dvs. for en forurening med et 0,5 m tykt lag ren muldjord over, vil  $X$  være lig med 0,5 m
- $D_L$  er diffusionskoefficienten i luft ( $\text{m}^2/\text{d}$ )
- $C_{L,\text{Baggrund}}$  er baggrundskoncentrationen i luften på stedet. Den sættes ofte til  $0 \text{ mg}/\text{m}^3$
- $N$  er en koefficient, der beskriver jordens evne til at transportere stoffer igennem poreluften. Denne beregnes af

$$N = \frac{V_L^{10/3}}{(V_L + V_V)^2} \quad \text{Ligning 12}$$

I Jagg-modellen sættes afdampningshastigheden lig med transporthastigheden op gennem jorden ( $J$ ).

#### 4.2.2 Koncentrationen i luften omkring bladene

Den simpleste metode til beregning af koncentrationen i luften omkring bladene er at antage, at der er kemikalievægt mellem kemikaliekoncentrationen i jorden, den lavere atmosfære og planten. Da især vind og turbulens i luften kontinuerligt vil fortynde stofferne i luftfasen, forventes systemet ikke at kunne nå ligevægt, hvorfor en antagelse om ligevægt vil give en for høj beregnet koncentration i luftfasen og i planten.

Jagg-modellen beregner koncentrationen i udeluften ved at beregne den højeste koncentration, som forventes at forekomme for enden af det forurenede område, nedstrøms vindretningen:

$$C_A = \frac{J \cdot L_x}{v \cdot Z} \quad \text{Ligning 13}$$

- $L_x$  er længden af det forurenede område i vindretningen (m). Som standardværdi anvender Jagg-modellen en værdi på 100 m for  $L_x$ ,
- $v$  er vindhastigheden (m/d). I Jagg-modellen benyttes en vindhastighed på 0,1 m/s svarende til vindstille (dog anvendes 1 m/s for stoffer, hvor acceptkriterier er fastlagt på basis af langtidseffekter).

Z er opblandingshøjden (m)

Opblandingshøjden er afhængig af vindhastigheden, men ved de lave vindhastigheder som forudsat i Jagg-modellen sættes den til 0,08 gange længden af det forurenede område:  $Z = 0,08 \cdot L_x$ , dvs. ved anvendelse af standardværdien for  $L_x$  på 100 m beregnes standardværdien for Z til 8 m. Dette er en meget høj værdi. Til sammenligning blev opblandingshøjden ( $\delta_{\text{luft}}$ ) sat til 0,005 m af Jury *et al.* (1990). I luftlaget over de 0,005 m, forventes fortyndningen at være så effektiv, at koncentrationen her kan sættes til 0. I forbindelse med vurdering af optag i planter vil det være mere realistisk at anvende en typisk højde for den aktuelle afgrøde.

Koncentrationen i udeluften beregnes herefter i Jagg-modellen fra:

$$C_L = \frac{J}{v \cdot 0,08}$$

Ligning 14

SAP-modellen, som er udviklet af Trapp og Matthies (1997), søger at beskrive den diffusive transport af stoffer i dampfasen mellem jorden og atmosfæren. Modellen udregner fordampningen fra jorden ved at løse diffusionsligningen for to tilgrænsende medier med forskellige egenskaber. Der antages øjeblikkelig ligevægt mellem luftfasen og jordmatricen eller plantematerialet i jord- og vegetationslaget, og en koefficient for den effektive diffusion udregnes.

Den vigtigste proces, som SAP-modellen således inkluderer, er dispersionen i luftfasen lige over jorden. Dispersionskoefficienten kan imidlertid kun - om overhovedet - betragtes som konstant i det stillestående, laminare luftlag lige over jordens overflade. Tykkelsen af dette laminare lag er meget afhængig af mikrometeorologiske forhold, hvor især vindhastigheden har stor betydning. Tykkelsen kan variere fra  $< 0,1$  mm og op til et par cm (R. Eiden, Meteorology Bayreuth, personlig samtale 1997).

Medens et kemikalies diffusionskoefficient i luftfasen er omkring  $0,5 \text{ m}^2/\text{d}$ , kan den turbulente diffusionskoefficient i luften være flere størrelsesordener højere. Få cm over jordens overflade dominerer dispersion over diffusion (Trapp & Matthies 1997), og turbulensen giver en hurtig opblanding i atmosfæren i højder op til 1000 m.

Optagelsesvejen fra forurenede jord via luft til planten vil derfor generelt kun være relevant for afgrøder, der vokser tæt på jorden. Variationen af turbulensen med højden over jordoverfladen kan kun måles med specialudstyr og vil sædvanligvis ikke være kendt. Derfor vurderes SAP-modellen ikke at være anvendelig i praksis. SAP-metoden er beskrevet i bilag F.

I tabel 4.1 er der foretaget en sammenligning af den beregnede, gennemsnitlige luftkoncentration ved:

- antagelse af ligevægt mellem koncentrationen i luften omkring bladene og i jorden
- SAP-modellen
- Jagg-modellen
- Jury-modellen

Der er antaget en meget lav vindhastighed på 0,1 m/s i det nederste luftlag, da vegetationen antages at dæmpe vinden væsentligt.

Beregningerne med Jury-modellen er foretaget ved at antage en jordforurening på 2,5 meters dybde uden dæklag, hvor fordampningshastigheden efter 100 dage er anvendt. Det bør i denne sammenhæng bemærkes, at ifølge Jury-modellen falder stoffernes fordampningshastighed initielt meget hurtigt, hvilket må skyldes, at transporthastigheden fra overfladen til luften er væsentligt hurtigere end transporthastigheden fra de nedre jordlag op til det øverste jordlag. Koncentrationen i luften er i Jury-modellen beregnet ud fra fordampningshastigheden efter samme princip som i Jagg-modellen. Her er opblandingshøjden dog sat til de førnævnte 0,005 m.

For SAP-modellen er gennemsnittet af den beregnede koncentration i de nederste 8 cm luft angivet.

I samme tabel (4.1) er den beregnede fordampningshastighed ved brug af de tre modeller sammenlignet.

Det fremgår heraf, at antagelsen om ligevægt i alle tilfælde giver de højeste beregnede luftkoncentrationer. SAP- og Jury-modellerne giver meget sammenlignelige koncentrationer i luften, og de er alle ca. 10% af koncentrationen ved ligevægt. Luftkoncentrationen beregnet ved Jagg-modellen giver for alle stoffer undtagen benzo(a)pyren ca. 100 gange lavere koncentrationer end de koncentrationer, der opnås ved SAP-modellen. Dette skyldes den store opblandingshøjde (8 m), der anvendes i Jagg-modellen.

Det fremgår endvidere, at Jagg-modellen og Jury-modellen beregner sammenlignelige fordampningshastigheder, samt at de forudsiger en væsentligt højere fordampningshastighed end SAP-modellen (undtagen for benzo(a)pyren), dvs. forskellen i de beregnede koncentrationer i luften omkring bladene skyldes primært, at Jagg-modellen forudsiger en større opblanding i luften end Jury- og SAP-modellen.

Tabel 4.1

Beregnete fordampningshastigheder og koncentrationer i luften over jorden. Total koncentration i jorden antaget lig med  $1 \text{ mg/m}^3$  våd jord. Jorden er karakteriseret ved 2% organisk kulstof, en densitet på  $1,3 \text{ kg tør jord/L}$ , en porøsitet på  $0,45 \text{ (L/L)}$  og et vandindhold på  $0,35 \text{ (L/L)}$ .

Stof	Fordampningshastighed ( $\text{mg/m}^2/\text{dag}$ )			Koncentration i luften omkring bladene ( $\text{mg/m}^3$ )			
	SAP	Jagg	Jury	Ligevægt	SAP	Jagg	Jury
Naphthalen	$1,5 \cdot 10^{-5}$	$2,2 \cdot 10^{-4}$	$1,0 \cdot 10^{-4}$	$3,4 \cdot 10^{-4}$	$5,7 \cdot 10^{-5}$	$3,1 \cdot 10^{-7}$	$2,4 \cdot 10^{-4}$
Benzo(a)pyren	$1,5 \cdot 10^{-8}$	$2,2 \cdot 10^{-10}$	-	$4,9 \cdot 10^{-10}$	$1,0 \cdot 10^{-14}$	$3,2 \cdot 10^{-13}$	-
MTBE	$2,0 \cdot 10^{-4}$	$2,8 \cdot 10^{-2}$	$6,5 \cdot 10^{-4}$	$3,7 \cdot 10^{-2}$	$2,4 \cdot 10^{-3}$	$4,1 \cdot 10^{-5}$	$1,5 \cdot 10^{-3}$
Toluen	$1,3 \cdot 10^{-4}$	$1,3 \cdot 10^{-2}$	$6,7 \cdot 10^{-4}$	$1,8 \cdot 10^{-2}$	$1,6 \cdot 10^{-3}$	$1,9 \cdot 10^{-5}$	$1,6 \cdot 10^{-3}$
n-dodecan	$1,3 \cdot 10^{-4}$	$1,3 \cdot 10^{-2}$	$1,3 \cdot 10^{-3}$	$2,3 \cdot 10^{-2}$	$1,9 \cdot 10^{-3}$	$1,8 \cdot 10^{-5}$	$2,9 \cdot 10^{-3}$
TCE	$1,1 \cdot 10^{-4}$	$9,2 \cdot 10^{-3}$	$5,9 \cdot 10^{-4}$	$1,5 \cdot 10^{-2}$	$1,4 \cdot 10^{-3}$	$1,3 \cdot 10^{-5}$	$1,4 \cdot 10^{-3}$

- Kan ikke beregnes med modellen

### 4.3 Modeller til estimering af planteoptaget

Indfaldsvinklerne for de eksisterende modeller til beregning af planteoptaget er enten regressionsligninger eller massebalancer opstillet for en eller flere dele af planten. Opstilling af massebalance for en eller flere dele af planten resulterer i et sæt af differentiallyigningssystemer. Der bruges stadig generelt ikke meget komplekse, numeriske løsningsmodeller i praktisk risikovurdering, med undtagelse af vurdering af pesticider. Alle former for indfaldsvinkler vil ikke desto mindre blive nævnt.

Modellerne, der bliver gennemgået, er delt op i to grupper:

1. fordelings- og regressionsmodeller
2. dynamiske modeller

De modeller, som er blevet udvalgt til yderligere undersøgelse, er detaljeret beskrevet i de respektive bilag.

#### 4.3.1 Fordelings- og regressionsmodeller

##### 4.3.1.1 Generelle udtryk for fordelingen mellem vand og plante

Et stofs fordeling mellem vand og en plantedel beskrives generelt ved en plante-vand fordelingskoefficient ( $K_{PW}$ ), defineret ved:

$$K_{PW} = \frac{\text{koncentration i plantedel (g/L)}}{\text{koncentration i opløsning (g/L)}} \quad \text{Ligning 15}$$

Trapp *et al.* (1994 og senere publikationer) har tolket en række målte data for ligevægtsfordelingskoefficienten mellem plantevæv og vand og introduceret en overordnet ligning:

$$K_{PW} = W + L a K_{OW}^b \quad \text{Ligning 16}$$

eller

$$\log(K_{PW} - W) = \log(L \cdot a) + b \cdot \log K_{OW} \quad \text{Ligning 17}$$

hvor

$K_{OW}$  er fordelingskoefficienten mellem n-oktanol og vand (koncentration ( $\text{kg/m}^3$ ) i oktanol : koncentration ( $\text{kg/m}^3$ ) i vand). Afhængigheden af  $\log K_{OW}$  forklares ved stoffets fedtopløselige sorption til plantelipider

$W$  er plantens vandindhold ( $\text{kg/kg}$ )

$L$  er plantens lipidindhold ( $\text{kg/kg}$ )

$b$  er en korrektionsfaktor for forskellene mellem opløsning i oktanol og sorption til plantelipider (for byg er 'b' 0,77 for rødder og 0,95 for blade)

$a$  er en korrektionsfaktor, der beskriver forskellen mellem vægtfylden for vand og vægtfylden for n-oktanol (1,22).

$K_{PW}$  angiver ligevægtsfordelingen mellem planter ( $\text{mg/L}$  frisk vægt) og vand ( $\text{mg/L}$ ) ( $\text{L/L}$  frisk vægt)

Fordelen ved denne ligning er, at eventuelle, tilgængelige, plantespecifikke data kan anvendes som 'W', 'L', 'a' og 'b'.

Tilsvarende ovennævnte model, kom Chiou *et al.* (2001) frem til følgende fordelingsbegrænsede model gennem en analyse af tilgængelige forsøgsdata i litteraturen for rodoptagelse:

$$C_p = a_p C_w (0,875 + 0,115 K_{CH} + 0,01 K_{OW}) \quad \text{Ligning 18}$$

hvor

$C_p$  er koncentrationen af en kemisk forbindelse i en plante (kun i rødderne)

$C_w$  er koncentrationen i rodvandet

0,875 er vandindholdet i roden

0,115 er kulhydratandelen

$K_{CH}$  er kulhydrat-vand fordelingskoefficienten

0,01' er lipidindholdet

Faktoren ' $a_p$ ' beskriver, hvor tæt koncentrationen er på ligevægtsvægtskoncentrationen. Den er tæt på 1 for vandopløselige forbindelser, hvilket betyder, at koncentrationen i rødder når ligevægt i forhold til det omgivende vand i jorden. Faktoren ' $a_p$ ' falder for de mere fedtopløselige forbindelser til f.eks. 0,11 for DDT. Faktoren ' $a_p$ ' varierer også i forhold til de enkelte plantearter og afgrøder, hvor rodkoncentrationer af fedtopløselige forbindelser ikke kan nå kemikalieligevægt med porevandet. Metoden har imidlertid den brist, at der ikke umiddelbart findes nogen metodik til beregning af faktoren ' $a_p$ '.

#### 4.3.1.2 Sorption til rødder - rodkoncentreringsfaktor (RCF)

Rodkoncentreringsfaktoren (RCF), som blev introduceret af Shone *et al.* (1974), defineres som koncentrationsforholdet mellem rod og vand eller jord ved den kemiske ligevægt, der skabes ved diffusion og andre transportprocesser.

Rodkoncentreringsfaktoren (RCF) udtrykkes som:

$$RCF = \frac{\text{koncentration i rod (g/kg)}}{\text{koncentration i opløsning (g/L)}} \quad \text{Ligning 19}$$

Tilsvarende er en rod-vand fordelingskoefficient ( $K_{RW}$ ) defineret:

$$K_{RW} = \frac{\text{koncentration i rod (g/L)}}{\text{koncentration i opløsning (g/L)}} = RCF \cdot d_{Rod} \quad \text{Ligning 20}$$

hvor

$d_{Rod}$  er røddernes densitet (kg/L)

Der findes nogle simple regressionsligninger til beregning af RCF. Den mest anvendte stammer fra Briggs *et al.* (1982). Den blev opstillet ud fra resultaterne af målinger af optaget af især phenylurea ukrudtsmidler i døde, udblødte bygrødder. For neutrale, organiske stoffer blev følgende ligning for forholdet mellem fedtopløseligheden (udtrykt som  $\log K_{OW}$ ) og sorptionen til rødder formuleret:

$$\log (RCF - 0,82) = 0,77 \log K_{OW} - 1,52 \quad (n = 7, r = 0,981) \quad \text{Ligning 21}$$



Anvendes den generelle beskrivelse af plante-vand fordelingskoefficienten (ligning 15), kan faktoren 0,82 således tolkes som bygrøddernes vandindhold, og lipidindholdet er ca. 0,025 ( $=10^{-1,52}/1,22$ ) kg/kg plante.

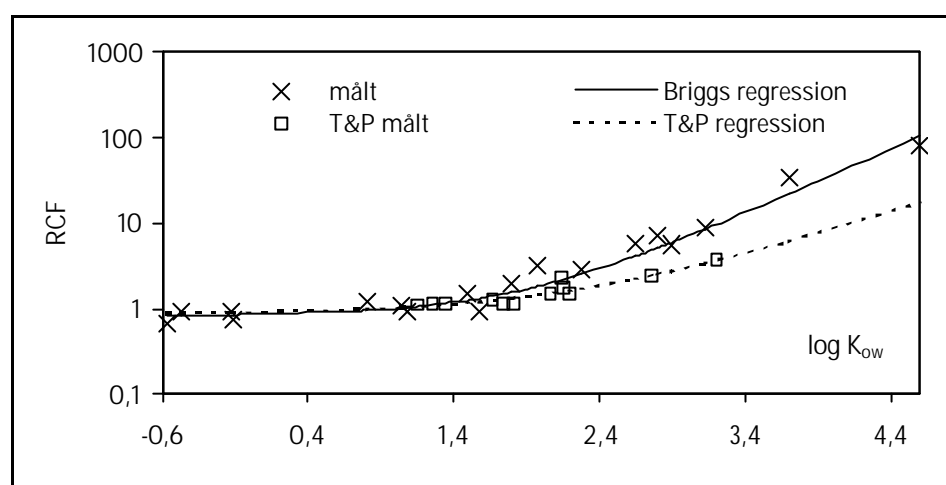
Et lignende resultat blev opnået med carbamater i udskårne stykker af rødder og stængler fra bønner (Trapp & Pussemier 1991):

$$\log(\text{RCF} - 0,85) = 0,557 \log K_{OW} - 1,34 \quad \text{Ligning 22}$$

(n=12, r = 0,96)

(svarende til et vandindhold på 0,85, og et lipidindhold på 0,037 ( $10^{-1,34}/1,22$ ) kg/kg) - jævnfør den generelle beskrivelse af plante-vandfordelingskoefficienten (ligning 15).

Denne ligning giver lavere rodkoncentreringsfaktorer for fedtopløselige stoffer end Briggs' regressionsligning som vist i figur 4.2.



Figur 4.2  
Måleresultater og regressionslinier for rodkoncentreringsfaktoren fra Briggs et al. (1982) (ligning 21) og Trapp & Pussemier (1991) (ligning 22)

BCF for rødder, defineret som forholdet mellem koncentrationen i planten (mg/kg våd plante) og koncentrationen i jorden (mg/kg våd jord), kan beregnes som følger:

$$\text{BCF} = \frac{\text{RCF}}{K_D + V_V/d' + K_{AW} \cdot V_L/d'} \quad \text{Ligning 23}$$

I de fleste eksisterende risikovurderingssystemer beregnes optagelsen i rødder ud fra antagelse om kemikalieligevægt, dvs. ud fra fordelingskoefficienten mellem rødder og jord ("bulk soil")  $K_{RB}$ .

I EUs Technical Guidance Documents on chemical risk assessment (TGD del I, kapitel 2, bilag VII) foreslår Europakommissionen, at koncentrationen i rødder beregnes ved at bruge en ligevægtsmetode (EC 1996), dvs. der antages ligevægt mellem stof i porevandet og stof i rødderne. Vand-rod fordelingskoefficienterne i TGD'en er baseret på den tidligere beskrevne

generelle model for fordeling af et stof mellem plantevæv og vand (ligning 16) (b er i TGD sat til 0,77 for rødder). I udkastet til en revideret TGD (EC 2002) er der ikke foreslået ændringer af denne beregningsprocedure, og den kaldes herefter for "TGD-rod".

#### 4.3.1.3 Transport fra rødder til stængel/stamme og blade

Transport fra rod til skud i vedvævet beskrives ofte ved transpirationsstrømmens koncentrationsfaktor TSCF:

$$TSCF = \frac{\text{koncentration i transpirationsstrømmen (kg/m}^3\text{)}}{\text{koncentration i opløsning (kg/m}^3\text{)}} \quad \text{Ligning 24}$$

Det ideelle ville være, at TSCF repræsenterede koncentrationsforholdet mellem transpirationsstrømmen og den eksterne opløsning, men da dette er svært at måle direkte, bestemmes TSCF meget ofte eksperimentelt ud fra den stofmængde, der findes i skud (Shone *et al.* 1974):

$$TSCF = \frac{\text{mængde i skud (g)}}{\text{koncentration i opløsning (g/mL)} \cdot \text{transpireret vandmængde (mL)}} \quad \text{Ligning 25}$$

Neutrale kemikaliers transport er mest effektiv for forbindelser med middel fedtopløselighed (dvs.  $\log K_{ow}$  1-4). Dette skyldes sandsynligvis, at det tager ret lang tid for polære forbindelser at trænge gennem cellemembranerne, samt at fedtopløselige forbindelser sorberer kraftigt til rodens væv og fortyndes ved vækst (Trapp 2000). Briggs *et al.* (1982) har tilpasset en optimal gausskurve til deres resultater:

$$TSCF = 0,784 \cdot \exp\left[\frac{-(\log K_{ow} - 1,78)^2}{2,44}\right] \quad \text{Ligning 26}$$

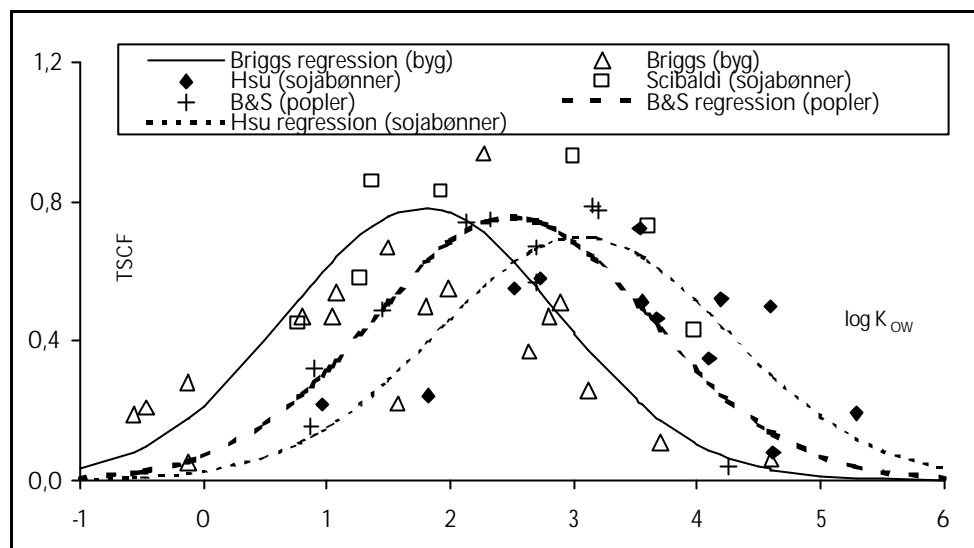
Senere forsøg udført af andre forskergrupper har givet lignende resultater, men med varierende optima. Burken og Schnoor (1998) fandt (fejlen i deres publikation er korrigeret) følgende for popler:

$$TSCF = 0,756 \cdot \exp\left[\frac{-(\log K_{ow} - 2,5)^2}{2,58}\right] \quad \text{Ligning 27}$$

og Hsu *et al.* (1990) fandt ved anvendelse af trykkammerteknik og sojabønner:

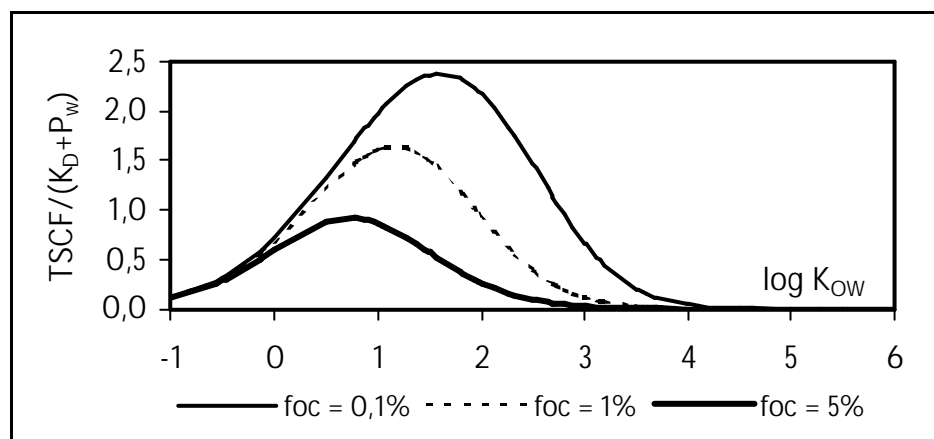
$$TSCF = 0,7 \cdot \exp\left[\frac{-(\log K_{ow} - 3,07)^2}{2,78}\right] \quad \text{Ligning 28}$$

Der blev fundet yderligere data hos Sicbaldi *et al.* (1997), som også anvendte trykkammerteknik og sojabønner. Alle data og regressionslinier fremgår af figur 4.3.



Figur 4.3  
Forskellige forfatteres måleresultater for TSCF og udledte regressionslinier (ligningerne, 26, 27 og 28)

Alle regressionskoefficienterne for TSCF er i forhold til koncentrationen i den eksterne opløsning. For at relatere transporten til optagelsen fra jorden skal koncentrationen af opløst kemikalie i forhold til jordkoncentrationen være kendt. Den opløste del kan beregnes, f.eks. ved hjælp af  $K_D$  (ligning 4). Den maksimale optagelse og transport forskydes så til de mere vandopløselige forbindelser, fordi fedtopløselige stoffer sorberes kraftigere til jordmatricen (figur 4.4).



Figur 4.4  
Forholdet mellem stofkoncentrationen i transpirationsstrømmen og i jorden (TSCF) relateret til  $\log K_{ow}$  for forskellige koncentrationer af organisk kulstof i jorden ( $f_{oc}$ ) og en porevandsandel ( $V_v$ ) på 30%

#### 4.3.1.4 Sorption til stængler og blade

Stængel-væske-koncentreringsfaktoren (SXCF) defineres som forholdet mellem koncentrationen i stænglens væv og koncentrationen i transpirationsstrømmen:

$$SXCF = \frac{\text{koncentration i stængel(mg/g)}}{\text{koncentration i transpirationstrøm (mg/mL)}} \quad \text{Ligning 29}$$

Briggs *et al.* (1983) har målt sorptionen af kemisk neutrale, phenylurea ukrudtsmidler i vandig opløsning til udblødte bygstængler og har fundet en forbindelse mellem SXCF og stoffernes fedtopløselighed svarende til den for rødder:

$$\log (SXCF - 0,82) = 0,95 \log K_{OW} - 2,05 \quad (n = 8, r = 0,98) \quad \text{Ligning 30}$$

Anvendes den generelle beskrivelse af plante-vand fordelingskoefficienten (ligning 15), kan faktoren 0,82 således tolkes som bygstænglernes vandindhold, og lipidindholdet er ca. 0,007 ( $=10^{2,05}/1,22$ ) kg/kg stængel.

For stænglen kan den såkaldte stængelkoncentreringsfaktor (SCF), der angiver forholdet mellem koncentrationen i stænglens væv og koncentrationen i jordens porevand, beskrives ved (Briggs *et al.* 1983):

$$SCF = TSCF \cdot SXCF = 0,784 \cdot \exp \left[ \frac{-(\log K_{OW} - 1,78)^2}{2,44} \right] \cdot [10^{(0,95 \cdot \log K_{OW} - 2,05)} + 0,82] \quad \text{Ligning 31}$$

Denne ligning var egentlig beregnet til brug ved udregning af ligevægtsfordelingen af organiske, kemiske forbindelser i forhold til *stængel*. Den er blevet brugt ukritisk (og forkert) til udregning af optagelse i hele den 'overjordiske' plante. Dette var tilfældet i ældre versioner af CSOIL (Holland, se detaljer nedenfor), som dog for nylig er blevet opdateret. Men det er stadig tilfældet i modelsystemet CLEA fra England og i HazChem, som bruges i Belgien (Jeroen Provost og dr. Johan Nouwen, præsentationer ved SETAC Organic Soil Contaminants Congress i København, september 2001).

#### 4.3.1.5 Sorption til vedvæv/xylem

Sorption til vedvævet kan være relevant i risikovurderinger af stoffer, der forurener jorden, f.eks. når det drejer sig om koncentrationen af giftige forbindelser i frugter fra træer og buske, som f.eks. nødder, æbler osv. I træer udgør vedvævet, hvor det transpirerede vand transporteres opad, træernes splintved. Trapp *et al.* (2001) målte sorptionen til vedvæv og udledte regressionskoefficienter for eg og pil:

Eg:

$$\log K_{Wood,W} = -0,27 (\pm 0,25) + 0,632 (\pm 0,063) \log K_{OW} \quad \text{Ligning 32}$$

(n=27, r=0,90)

Pil:

$$\log K_{Wood,W} = -0,28 (\pm 0,40) + 0,668 (\pm 0,103) \log K_{OW} \quad \text{Ligning 33}$$

(n=27, r=0,79)

Sorptionen til ved er ret høj og ligner sorptionen til organisk materiale i jorden, dvs. fedtopløselige forbindelser forbliver i træstammerne i lang tid og når formodentlig aldrig ud til frugterne (Trapp *et al.* 2001).

#### 4.3.1.6 Sorption til blade

En plantes 'overjordiske' dele er alt det plantevæv, der vokser over jordoverfladen, dvs. stængler, blade og frugter. Optagelse af kemikalier kan foregå både fra jorden og fra luften.

Der kan udledes følgende sorptionsligning mellem blade og luft for kemikalier (Trapp *et al.* 1990, Trapp 1995), hvor:

$$K_{LA} = \frac{C_L}{C_A} = \frac{K_{LW}}{K_{AW}} \quad \text{Ligning 34}$$

hvor

L står for "leaf" (blad)

A står for "air" (luft)

W står for "water" (vand)

$K_{LW}$  er blad-vand fordelingskoefficienten, som f.eks. kan estimeres ud fra det generelle udtryk for fordelingen mellem plante og vand.

#### 4.3.2 Travis & Arms' regressionsligning

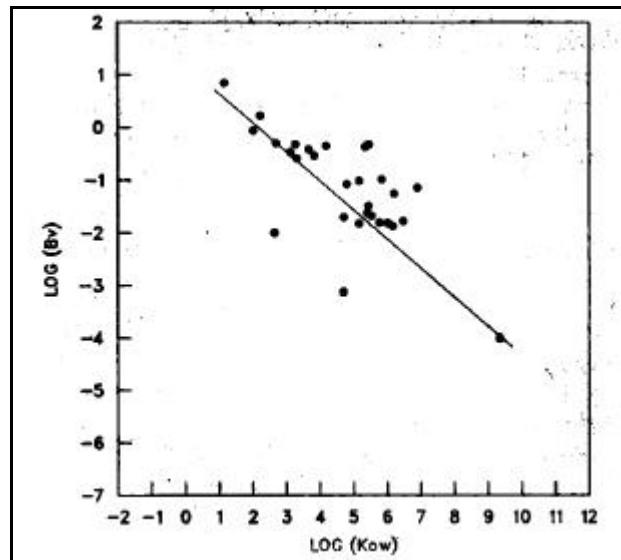
Travis & Arms (1988) har udviklet en regressionsligning for bioakkumulering af organiske stoffer i oksekød, mælk og planter. De empiriske data, som blev brugt til regressionsligningen, blev udvalgt fra litteraturen og var især for pesticider med en  $\log K_{ow}$  i intervallet 1,15 til 9,35. Regressionsligningen for optagelse i planter var:

$$\log Bv = 1,588 - 0,578 \cdot \log K_{ow} \quad (n=29, r = 0,73) \quad \text{Ligning 35}$$

hvor 'Bv' er "biokoncentreringsfaktor vegetation", der er forholdet mellem stofkoncentrationen i 'overjordiske' plantedele (mg/kg tørvægt) og koncentrationen i jorden (mg/kg tørstof).

Fordelen ved denne regressionsligning er, at den er baseret på empiriske data fra markforsøg og derfor integrerer alle mekanismerne i marken. Desuden skal der kun indsættes én parameter,  $\log K_{ow}$ , hvilket gør, at den er meget let at bruge.

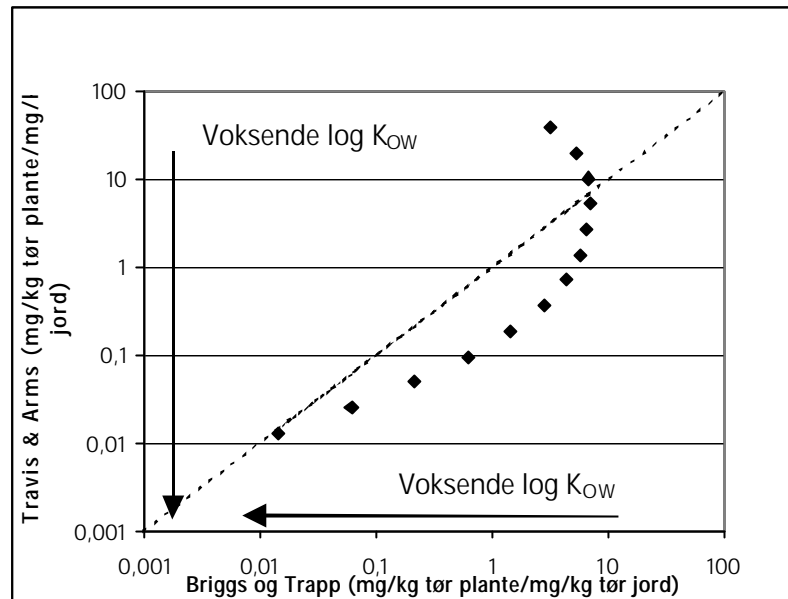
Ved at se nærmere på regressionen (figur 4.4) fremgår det, at optagelsen af kemiske forbindelser i planter falder med faldende  $\log K_{ow}$ , men indpasningen påvirkes betydeligt af værdien af det eneste stof med en ekstremt høj  $\log K_{ow}$  (polybromeret biphenyl,  $\log K_{ow}$  9,35). Forskellen på værdierne i midterområdet er næsten en faktor 1000.



Figur 4.5  
Forholdet mellem biokoncentreringsfaktorer i planter og oktanol-  
vand fordelingskoefficienter (kopieret fra Travis & Arms 1988)

I figur 4.5 er de beregnede koncentrationer i en bladafgrøde for stoffer med  $\log K_{ow}$  mellem 0 og 6 ved anvendelse af Travis & Arms' korrelation sammenlignet med den koncentration, der kan beregnes, ved at anvende Briggs' udtryk for TSCF sammen med det generelle udtryk for fordelingen mellem plantemateriale og vand ( $a=1,22$ ;  $b=0,95$ ;  $W=0,85$ ;  $L=0,025$ ) og beregning af  $K_D$  ud fra  $K_{oc}$  ( $f_{oc}=0,02$ ).

Det ses, at sammenhængen mellem de koncentrationer, der forudsiges ved kombination af de forskellige fordelingsmodeller og Travis & Arms' udtryk, ikke er i overensstemmelse med hinanden. Travis & Arms giver tilsyneladende lavere beregnede koncentrationer i bladafgrøden end kombinationsmodellen for stoffer med høje  $\log K_{ow}$ , mens den for stoffer med lave  $\log K_{ow}$ -værdier giver højere værdier.



Figur 4.6

Sammenligning mellem Travis & Arms' udtryk og kombinationen af de nævnte ligevægtsfordelingsmodeller. Den diagonale, stiplede linie viser, hvor de beregnede værdier fra de to modeller vil være ens

Forskellen mellem de to udtryk kan, udover at Travis & Arms' udtryk er baseret på stoffer med  $\log K_{ow}$  ca. 1-9,4, mens datagrundlaget for Briggs' og de øvrige ligninger kun omfatter stoffer med  $\log K_{ow}$  i intervallet  $-0,8$  til  $6$  (figur 4.2), også skyldes, at Travis & Arms ikke har taget hensyn til jordens karakteristika, dvs. at plantetilgængeligheden varierer med f.eks. jordens indhold af organisk kulstof. Optag af stoffer gennem jordstænk på bladene kan være indirekte inkluderet i Travis & Arms, men er ikke inkluderet i kombinationsudtrykket. Endelig kan forskellen skyldes usikkerheden på udledningen af Travis & Arms' korrelationen, hvor værdien for ét enkelt stof har en meget stor indflydelse på udtrykket.

#### 4.4 Dynamiske modeller

De dynamiske modeller er formuleret som massebalancer for hele planten eller dele af planten. Massebalancen for planten eller den enkelte plantedel er så igen bygget op af beskrivelser af optags-, nedbrydnings-, frigivelses- og plantevækstprocesserne. Dette afsnit indledes derfor med en kort beskrivelse af de forskellige enhedsprocesser, hvorefter de forskellige modeller, der er sammensat af enhedsprocesserne på forskellig måde, kort gennemgås.

##### 4.4.1 Optagelse gennem rødderne

Stoffer i jordens porevand og -luft vil diffundere ind i rødderne. Den styrende faktor for den diffusive transport mellem jord og rødder er, hvor langt systemet porevand-planterødder er fra ligevægt.

Der kan desuden ske et passivt optag via transpirationsvandet. Dette kan simpelt beregnes som produktet af transpirationsstrømmen (vandtransporten i planten) og stoffets koncentration i porevandet. Størrelsen af transpirationsstrømmen er således af stor betydning for rodoptaget.

#### 4.4.2 Optagelse gennem bladene

Optagelse gennem bladene fra luften kan ske på to måder:

- Diffusion fra luften ind gennem bladenes yderste lag (overhud og epidermis). Her er den styrende faktor for den diffusive transport mellem luft og blade, hvor langt luft-blad systemet er fra ligevægt.
- Diffusiv transport ind i bladene via spalteåbningerne, der er åbne i dele af døgnet, og som har stor betydning for fordampningen, efterfulgt af diffusion gennem den intercellulære luft. Trapp (1995) beregnede optaget gennem spalteåbningerne ud fra den mængde vand, der fordamper fra en plante, og antagelse om, at stoffluxen gennem spalteåbningerne er proportional med forskellen mellem partialtrykket ved ligevægt og det aktuelle partialtryk i den omgivende luft.

Det er vist (Riederer 1995), at den videre transport igennem bladvævet (mesofyl) for langt de fleste stoffer ikke kontrollerer den samlede transporthastighed ind i bladene.

#### 4.4.3 Optagelse via direkte jordkontakt

Nettooverførelshastigheden  $TF_{net}$  fra jordpartikler kan i de fleste tilfælde antages at være cirka lige så høj som forholdet mellem fastsiddende jord og plantens totalvægt (se bilag E). Når et kemikalie er aflejret på et blad, kan det enten fordampe, blive skyllet af, nedbrydes eller vandre ind i bladet. Mængden af fastsiddende jordpartikler er meget plantespecifik. Den er højest for afgrøder, der vokser tæt ved jorden (salat, jordbær), og for blade, der har en form så partikler skylles ind i plantens indre (f.eks. bladrossetter som hos salat). Tabel 4.2 giver et overblik over empiriske værdier for jords massebelastning af planter. Salat har den største belastning med 0,26 g jord (tørvægt) aflejret pr. 1 g salat (tørvægt). Gennemsnittet for alle værdierne er 0,025 g jord pr. g plante. Ved en tørvægt på 20% i planter og en tørvægt på 90% i jord svarer dette til 0,005 g jord (tørvægt) pr. g frisk plante og 0,006 g jord (vådvægt) pr. g frisk plante.



Tabel 4.2  
Empiriske værdier for jordpartiklers massebelastning af planter  
(g jord pr. g plante (tørvægt))

Plante	Massebelastning	Reference
Græsningsgræs < 25 cm højt	0,0045	Pinder III et al. (1991)
Græsningsgræs > 25 cm højt	0,00024	Pinder III et al. (1991)
Broccoli	0,01	Pinder III & McLeod (1989)
Kål	0,0011	
Salat	0,260	
Solsikke	0,0026	
Tobak	0,0021	
Turnips	0,032	
Græs	0,018	Li et al. (1994)
Tomat	0,017	
Sojabønne	0,0021	
Hvede	0,0048	
Majs	0,0014	
Hestebønne	0,0095	
Rajgræs	0,0058	
Gennemsnit	0,025	

#### 4.4.4 Transport i vedvæv

Den del af stofferne, der befinder sig i vandfasen, vil blive transporteret med transpirationsstrømmen op til bladene gennem vedvævet. Dette beskrives oftest som en passiv transport, hvor der dog tages højde for, at en vis del af stoffet vil bindes til vedvævet i planten undervejs.

#### 4.4.5 Transport i sivæv

Den del af stofferne, der befinder sig i vandfasen, kan blive transporteret med sivæsvæsken ud til frugterne samt tilbage til rødderne. Da sivæsvæsken endvidere har et højt tørstofindhold, vil også en del af det bundne stof kunne blive transporteret gennem sivævet. Transporten er passiv, men de opløste stoffer vil naturligvis kunne bindes til selve sivævet. Transport af stoffer gennem sivæv til frugterne kan have betydning for indholdet af stofferne i frugterne.

#### 4.4.6 Vækst

Stofferne vil blive fortyndet, ved at planterne vokser. Der eksisterer talrige mere eller mindre sofistikerede modeller til beregning af plantevæksten. Ved modelleringen af stoffer i planter antages ofte en eksponentiel vækst af planten, hvilket giver en første ordens fortyndingshastighed for stoffet.

#### 4.4.7 Omsætning og andre nedbrydningsprocesser

Der er ingen tvivl om, at en del af stofferne vil blive omsat i planten. Stofferne nedbrydes ikke nødvendigvis helt, men kan blive omdannet til andre stoffer eller blive indbygget i plantevævet. I modellerne antages sædvanligvis et første ordens henfald, men det kan være vanskeligt at skønne omsætningshastighedskonstanten for et stof, da denne udover at være stofspecifik også er afhængig af plantearten.

#### 4.4.8 Generisk 'one-compartment' model for optagelse i 'overjordiske' plantedele

Trapp & Matthies (1995) har foreslået en 'one-compartment' model for bladafgrøders optagelse af organiske stoffer. Denne model er en meget forenklet udgave af en tidligere model (Trapp *et al.* 1994), og den bruges i dag i EUs modelværktøj til risikovurdering EUSES (EC 1996a) samt er foreslået til det hollandske CSOIL risikovurderingsværktøj (Versluijs *et al.* 1998). Metoden er detaljeret beskrevet i bilag A.

Modellen antager, at miljøfremmede, organiske stoffer kun optages passivt, dvs. via diffusion og advektion. De mekanismer, der indgår i modellen, er transport fra rødderne til skud, diffusiv udveksling med luften, omsætnings- og nedbrydningsprocesser, samt fortynding ved eksponentiel vækst. Det sidstnævnte gælder kun for planter, som høstes, inden de er modne, f.eks. spinat og salat. Modellen kan med andre ord ikke bruges til afgrøder, der dyrkes til modenhed som f.eks. korn.

Ved opstilling af en massebalance for de 'overjordiske' plantedele, opnås en første ordens, lineær differentiaalligning, som løses analytisk for den dynamiske ligevægtstilstand. Metoden er detaljeret beskrevet i bilag A.

Beregning af koncentrationen i specifikke planteafgrøder kræver specifikke plantedata, f.eks. vækstperiode, samlet bladareal og lipidindhold i blade. TGD anvender ligningen generisk (dvs. den gælder for en generel "modelplante"). Ligningen tager ikke hensyn til alle de mulige transportmekanismer ind i den 'overjordiske' del af planten, for eksempel er aflejring af jord og luftbårne partikler udeladt. Modellen har imidlertid den fordel, at luftfasekoncentrationen (baggrundsværdien i luften) kan medtages, hvilket gør det muligt at vurdere, om en forurening af planten stammer fra jorden eller fra luften.

#### 4.4.9 'Four-compartment' optagelsesmodel PlantX

PlantX-modellen (Plant Exposure model) (Trapp *et al.* 1994) er den tidligere udgave af ovennævnte 'one-compartment' model. Den er baseret på de samme antagelser, men bruger fire 'compartments', nemlig rødder, stængel, blade og frugter. 'Four-compartment' modellens løsning er numerisk (Eulers ettrinssystem). Trapp (1995) giver en detaljeret beskrivelse af denne model. Den er blevet valideret med data fra forsøg med radioaktivt mærket bromacil (et ukrudtsmiddel) og gav god overensstemmelse med måleresultaterne (Trapp 1995). Modellen er ikke særlig anvendelig til rutineundersøgelser, da den kræver mange data. Der findes en offentligt tilgængelig FORTRAN 77 version på internettet:  
<http://www.usf.uni-osnabrueck.de/archive/~strapp/Plantx.html>.

#### 4.4.10 'Three-compartment' model med flygtighedsprincip fra Mackay

'Three-compartment' modellen med flygtighedsprincip, som er udviklet af Mackay og hans medarbejdere, ligner PlantX-modellen. Den seneste version er beskrevet i Hung & Mackay (1997). En tidligere, mere avanceret version blev offentliggjort af Paterson *et al.* (1994). Den seneste version af modellen har tre massebalanceligninger, som er udformet efter fugacitetsprincippet (flygtighedsprincippet), og som løses numerisk. Til forskel fra PlantX-

modellen er der medtaget en nedadgående kemikaliestrøm i sivævsaften. Modellen er blevet valideret med de samme data som PlantX-modellen (bromacil) og gav god overensstemmelse med måleresultaterne (Hung & Mackay 1997). Der var stort set ingen forskel ved sammenligning med den tidligere version fra Paterson *et al.* (1994).

#### 4.4.11 Model for planteoptagelse, transport, akkumulering og bionedbrydning, UTAB

Modellen for planteoptagelse, transport, akkumulering og bionedbrydning, UTAB, blev udviklet på en jordbrugsforsøgsstation ved Oregon State University i Corvallis (Boersma *et al.* 1988). Modellen klarer den sammenkoblede transport af vand og opløste stoffer i planter. Den første version har 33 'compartments', og der er 22 'compartments' i den version, som blev præsenteret af Lindstrom *et al.* (1991). Der udarbejdes en massebalance for hvert 'compartment', og hver massebalance bruger en differentiaalligning. Det faktum, at der skal bruges resultater fra eksperimenter til kalibrering af modellen, før den kan udvise rimelige resultater (Boersma *et al.* 1991), samt den store mængde data, som er nødvendig, og den enorme udregningstid på grund af det store antal differentiaalligninger, gør, at den er mindre egnet til rutinemæssig brug i risikovurdering.

#### 4.4.12 Gulerodsmodellen - Advektion ind i rødder

Gulerodsmodellen er en strømningsbaseret, dynamisk ligning, der beregner koncentrationen ved den dynamiske ligevægtstilstand (steady-state) (Trapp 2002). Den betragter den horisontale indstrømning med transpirationsstrømmen som tilførsel, den horisontale udstrømning som udskillelse og omsætningen i planten som en fjernelse. Fortynding ved vækst kan forekomme. Diffusiv optagelse antages at være begrænset til skrællen, som ofte ikke spises.

Gulerodsmodellen er detaljeret beskrevet i bilag B.

Det er blevet vist, at antagelsen om, at diffusiv optagelse er begrænset til skrællen, er valid for meget fedtopløselige og ikke flygtige forbindelser, som f.eks. benzo(a)pyren og PCB-forbindelser (Trapp 2002). En større andel af de stoffer med en høj vand luft fordelingskoefficient ( $K_{AW}$ ) vil være i luftfasen i roden, hvor den diffusive transport er hurtigst. For denne type af stoffer er antagelsen om, at diffusiv optagelse er begrænset til skrællen ikke valid. Modellens anvendelsesområde er således begrænset til ikke-ioniserede og fedtopløselige forbindelser med lavt damptryk. Det kan vises, at det kun er for kemiske forbindelser med  $\log(K_{OW}/K_{AW}) > 8$ , at transport gennem skrællen til selve rodfrugten kan udelukkes. Dette gælder for benzo(a)pyren, men ikke for nogen af de andre udvalgte modelstoffer. Disse forbindelser forventes at ligge tæt på kemikalieligestvægt.

Til vurdering af betydningen af den diffusive transport ind i guleroden, kan følgende analytiske løsning for den horisontale diffusion af et stof ind i et tværsnit af roden anvendes (Trapp 2002, Crank 1970):

$$C(z, t) = C_0 \cdot \operatorname{erfc} \frac{z}{\sqrt{4 \cdot D \cdot t}}$$

Ligning 36

hvor

$C(z,t)$	er koncentrationen til tiden $t$ i afstanden $z$ fra rodens overflade
$D$	er den effektive diffusionskoefficient for stoffet i planten
$z$	er afstanden fra rodens overflade
$C_0$	er koncentrationen på overfladen af roden, svarende til den koncentration, hvor der er ligevægt mellem jordens porevand og guleroden

Til udledning af ligning 36 er der set bort fra advektion, vækst og nedbrydning, og der er antaget en konstant koncentration på overfladen af roden.

#### 4.4.13 Kartoffelmodellen - diffusiv optagelse i en kugleformet rod

Kartofflen er Danmarks vigtigste grøntsag. Kartoffelknolden er ikke en rod, men et opbevaringsorgan, som egentlig er en del af stængelen (Franke 1987). Stængelknolden er ikke en del af rodsystemet, den har ingen forbindelse med vedvævet, og den får kun tilførsler fra sivæv (Sitte *et al.* 1991). Advektiv transport af miljøfremmede stoffer fra jorden ind i kartofflen er derfor ikke sandsynlig (sivævet løber fra bladene til rødderne). Da spredning i luftfasen foregår hurtigt, kan diffusiv optagelse af flygtige forbindelser være en relevant mekanisme. På den baggrund er der blevet udledt en kartoffelmodel, der beregner transporten ind i en kartoffel – også af flygtige stoffer. En foreløbig version af modellen er beskrevet i bilag C. Denne model er endnu ikke publiceret og verificeret, da der ikke findes tilgængelige måledata for optagelse af flygtige stoffer i kartofler.

Udregninger efter dette princip er vist i bilag C. Det kan konkluderes, at med hensyn til nærværende projekt kan ligevægtsantagelsen anvendes for  $n$ -dodecan, toluen og trichlorethen og desuden for MTBE, men for PAH-forbindelser er en udvidet model, som f.eks. kartoffelmodellen, af meget stor betydning.

#### 4.4.14 Transport til frugter på træer

Frugter fra træer, som f.eks. æbler, er en anden, meget væsentlig gruppe af spiselige afgrøder i Danmark. Derfor bør frugter inkluderes i en risikovurdering. Træer er grundlæggende forskellige fra urter (grøntsager) på grund af størrelsen, på grund af det dominerende ved-'compartment' og på grund af alderen. Trapp *et al.* (2001) har for nylig anvendt en transportmodel til beregning af organiske stoffers transport i træstammer. Træmodellen medtager stofindstrømning i stammen via vedvæv, udstrømning efter ligevægt, fortynding ved vækst og første ordens omsætning. Udveksling med luften er ikke medtaget.

Kemikalier med ikke alt for høje  $\log K_{ow}$ -værdier ( $\log K_{ow}$  1-6) har potentiale for at blive akkumuleret i betydelige mængder i stammen efter at være optaget i rødderne. For meget fedtopløselige kemikalier er koncentrationerne for ligevægtstilstand i stammen lave sammenlignet med jordkoncentrationen på grund af langsom optagelse og fortynding ved vækst. Den her anvendte frugttræmodel er ikke ny, den kombinerer princippet for transport i stammer med transporten via sivæv til frugter, som anvendes i PlantX-modellen (Trapp 1995).

Metoden er detaljeret beskrevet i bilag D.

#### 4.4.15 Simuleringsnetværksmodel for atmosfære-plantjord, SNAPS

Simuleringsnetværksmodellen SNAPS kombinerer PlantX-modellen med jord-vandmodellen SWACRO, som også beregner plantevækst, og en jord-kemikalietransportmodel (Behrendt & Matthies 1995). I princippet er dette simuleringsnetværk et værdifuldt værktøj, fordi det forbinder transporten i jorden med transporten i vegetationen. Det viste sig imidlertid ved praktisk brug på GSF-centret i München, at den store mængde data, som er nødvendig for at bruge modelsystemet, er kritisk og tidskrævende. Resultatets usikkerhed er også meget høj på grund af det store antal mekanismer, der indgår samtidig. Modellen kan derfor ikke anbefales til praktisk anvendelse i risikovurdering.

#### 4.5 Risikovurderingsværktøjer

Der er blevet udviklet og anvendes adskillige systemer til vurdering af risici ved jordforurening, nogle til lovgivningsformål og nogle som beslutningsstøtteværktøjer. En gennemgang af eksisterende risikovurderingsværktøjer i Europa og USA med henblik på jord til planteoverførslen af organiske stoffer præsenteres nedenfor. Gennemgangen er hovedsagelig baseret på rapporter, der er udarbejdet på RIVM i Holland i forbindelse med opdateringen af CSOIL-modellen (Rikken *et al.* 2001, Versluijs *et al.* 1998).

##### 4.5.1 England: Contaminated Land Exposure Assessment model, CLEA

CLEA-modellen blev udviklet i England til fastlæggelse af retningslinier, men CLEA kan også bruges til at foretage områdespecifikke risikovurderinger. Planteoptagelsesmodulet er i stand til at håndtere både miljøfremmede, organiske stoffer og tungmetaller. Den mængde jord, mennesker indtager om dagen, betragtes som aldersspecifik. Desuden medtages indtagelse af jord som partikler, der sidder fast på afgrøder, og som ikke er blevet fjernet ved normal tilberedning (3%). Planteoptagelsesalgoritmen er baseret på regressionsligningerne af Briggs *et al.* (1982, 1983).

##### 4.5.2 Tyskland: Umweltmedizinische Beurteilung der Exposition des Menschen durch alltagsbedingte Schadstoffe, UMS

UMS-modellen blev udviklet til detaljeret vurdering af forurenede grunde, så arten og omfanget af human- og grundvandseksponering kunne beregnes. På basis af fysisk-kemiske og toksikologiske data, områdespecifikke karakteristika og befolkningsadfærd kvantificerer UMS-systemet den aktuelle eller potentielle eksponering, som er relevant i forhold til menneskers sundhed. Jordindtaget for børn og voksne ligger mellem 50 og 500 mg/dag, baseret på publicerede data. Forbruget af planter fordeler sig på 15% rodfrugter og 85% 'overjordiske' grøntsager (herunder kartofler). Rodforurening beregnes ved hjælp af RCF af Briggs *et al.* (1982). En netop udviklet (udokumenteret) empirisk ligning på basis af Trapp & Matthies (1995) koncept for luftformig aflejring anvendes for 'overjordisk' vegetation.

##### 4.5.3 Californien: CalTOX

CalTOX-modellen består af et sæt regnearksmodeller og datasæt, der relaterer koncentrationen af et kemikalie i jorden til risikoen for sundhedsskadelige effekter for en person, der bor eller arbejder i nærheden af eller på den forurenede grund. Den kan beregne områdespecifikke, sundhedsbaserede

jordrensningskoncentrationer på basis af opgivne målsætninger for risikoniveau. CalTOX anvender de ligninger, der findes i US EPA's Risk Assessment Guidance for Superfunds til vurdering af eksponering og risiko (US EPA 1995). Jordindtagelse medtages kun i forbindelse med køkkenhaver, med 22 mg/dag som gennemsnitligt jordindtag i hele livet. Optagelsen af miljøfremmede, organiske stoffer i afgrøder er baseret på en simplificeret version af Paterson-Mackay-modellen. Tidligere blev Travis & Arms' ligninger anvendt (se ovenfor).

#### 4.5.4 Holland: CSOIL

Humaneksponeringsmodellen CSOIL anvendes i Holland til fastlæggelse af grænseværdier for jord og grundvand. CSOIL blev udviklet til beregning af potentiel human eksponering i forbindelse med forurenede landområder. Indtil for nylig byggede CSOIL på Briggs *et al.* (1982) ligevægtskoncept til beregning af eksponering via afgrøder. Men på basis af en vurdering af eksisterende modeller konkluderede Verluijs *et al.* (1998), at CSOIL-modulet for transport af stoffer til stængel og blade kunne forbedres ved anvendelse af Trapp & Matthies' model, ligesom Rikken *et al.* (2001) i en senere RIVM-rapport argumenterede kraftigt for at implementere denne model i CSOIL.

#### 4.5.5 USA: Soil Screening Guidance SSG

Den amerikanske miljøstyrelse, US EPA, har "identificeret frugter og grøntsager fra nyttehaver som en sandsynlig eksponeringsvej for forurenende stoffer i jord i beboelsesområder" og fik derfor vurderet niveauet for jord-plante-menneske eksponeringsvejen. Eksisterende empiriske data for planteoptagelse af organiske forbindelser blev vurderet med det resultat, at "der er tilgængelige optagelsesdata for organiske stoffer for omkring 25% af de stoffer, som EPA fører tilsyn med" og "at modellering kan være det eneste alternativ til vurdering af jord-plante-menneske eksponeringsvejen for mange stoffer i den nærmeste fremtid". Samme kilde udtaler, at "et af de mest lovende værktøjer til anvendelse som et risikovurderingsværktøj er PlantX" (US EPA 1995). Det er dog stadig Travis & Arms-modellen, der anvendes. Den er integreret i US EPAs Risk Assessment Information System til beregning af risiko (se [http://risk.lsd.ornl.gov/prg/for\\_ent\\_data.shtml](http://risk.lsd.ornl.gov/prg/for_ent_data.shtml)).

#### 4.5.6 Europa: Technical Guidance Document og the European Union System for the Evaluation of Substances, EUSES

Europakommissionen udgav i 1996 "Technical Guidance Document in Support of Commission Directive 93/67/EEC on Risk Assessment for new Notified Substances and Commission Regulation (EC) No 1488/94 on Risk Assessment for Existing Substances" (EC 1996), kaldet TGD'en. I TGD'en blev det foreslået at anvende Trapp & Matthies-modellen (1995) til estimering af koncentrationen i stængel og blade. Modellen blev implementeret i EUSES (EC 1996a) (herefter kaldt "TGD-blad"). EUSES blev udviklet af RIVM (National Institute of Public Health and the Environment) i Holland og kan fås fra EUs Kemikaliekontor (EC/DG XI) i Ispra, Italien. I forløberen, USES-modellen, blev Briggs-modellen anvendt både til rødder og blade.

#### 4.5.7 Konklusion

I ældre modelsystemer, som tidligere versioner af CalTox, forløberen for EUSES (USES) og hidtil i CSOIL, har brugen af regressionsligninger til

beregning af planteoptagelse fra jorden været dominerende. For nylig har lettere løsningsmodeller med differentialligninger afløst disse regressionsligninger (f.eks. i CSOIL fra Holland, CalTOX fra Californien og EUSES). I Europa er TGD-blad modellen mest udbredt.





# 5 Validering af modellerne

## 5.1 Tidligere valideringsstudier

### 5.1.1 Valideringsstudier af SAP-modellen

SAP-metoden har været brugt og testet af Thomas *et al.* (1998) til beregning af overførslen af polyklorerede biphenyler (PCB) fra luften til græsgange, hvor målte og modellerede koncentrationer blev sammenlignet ved forskellige højder. Den bedste overensstemmelse blev fundet, når den simulerede koncentration blev taget som et gennemsnit for en højde på 5 cm fra jordoverfladen til planten. For PCB congener 52 forudsagde modellen 1,2 pg/g græs, men der blev målt 44 pg/g. For PCB 153 blev der forudsagt 55 pg/g og målt 66 pg/g. For PCB 180 blev der forudsagt 26 pg/g og målt 40 pg/g. Selvom der således er afvigelser mellem målte og beregnede koncentrationer, var størrelsesordenen på de forudsagte koncentrationer korrekt.

### 5.1.2 Polder *et al.*: Validering af Briggs' regressionsligninger

Polder *et al.* (1996) udførte et valideringsstudie på Briggs' regressionsligninger, som på den tid var en del af USES (Uniform System for the Evaluation of Substances). Eksisterende eksperimentelle værdier i litteraturen for RCF-, TSCF- og SCF-værdier blev indsamlet fra forskellige databaser. For at minimere eksperimentelle fejl grundet fordampning af stoffer indgik kun stoffer med lav flygtighed ( $K_{AW}$  under 0,03) i valideringsstudiet. Eksperimentelle data blev sammenlignet med tilsvarende estimerede værdier for RCF, TSCF og SCF. Det blev konkluderet, at Briggs' ligning estimerede RCF-værdierne tilfredsstillende i forhold til formålet med USES (indledende risikovurdering af kemikalier), men RCF blev ofte overestimeret for stoffer med en  $\log K_{OW} > 4$ . De målte TSCF var i mere eller mindre overensstemmelse med værdierne forudsagt af Briggs *et al.* Adskillige af de målte SCF-faktorer var meget højere end de værdier, der blev beregnet ved Briggs' udtryk, hvorfor forbedringer i metoden til beregning af SCF syntes nødvendig.

### 5.1.3 Jager & Hamers: Validering af Trapps regressionudtryk

Jager & Hamers (1997) evaluerede estimeringsmetoder til beregning af bioakkumuleringen i forbindelse med risikovurdering af organiske stoffer. Blandt modellerne indgik TGD-rod og TGD-blad. Sandsynligvis anvendtes de samme data, som blev anvendt af Polder *et al.* (1996). Det blev fundet, at forskellen mellem de beregnede RCF-faktorer ved anvendelse af Briggs' henholdsvis TGD-rod var lille, samt at begge ligninger kan beskrive de eksperimentelle data rimeligt. Estimerede værdier for blad-luft fordelingen var konsistente med de målte data, selvom data både for forskellige planter og fra vidt forskellige, eksperimentelle metoder blev anvendt. Estimeringen af TSCF blev fundet at være tvivlsom, da der tilsyneladende kun er en svag korrelation med  $K_{OW}$ .

Det blev konkluderet, at TGD-rod og TGD-blad er rimelige til estimering af koncentrationerne i afgrøder, men det blev også anbefalet, at betydningen af de forskelle, der eksisterer i de forskellige afgrøder, bliver beskrevet i modellerne.

I et efterfølgende studie blev TGD-blad sammenlignet med Riederers '4-compartment' model, der beskriver optaget af stoffer gennem blade. Selvom Riederers model er mere kompleks end TGD-blad, tager denne ikke hensyn til plantevækst, og den blev derfor ikke fundet passende for stoffer, der har en høj blad-vand fordelingskoefficient.

#### 5.1.4 Schwartz et al.: Validering af TGD-blad beskrivelse af optaget i blade

Schwartz (i Berding *et al.* 2000) undersøgte TGD-blad modellen. Beregnede koncentrationer for optaget af PCB var i rimelig overensstemmelse med resultater fra markforsøg (under en faktor 10 i afvigelse undtagen for PCB 28). De beregnede koncentrationer for tetrachlordibenzodioxin (TCDD) var i god overensstemmelse med rapporterede værdier, medens koncentrationerne for alle højere klorerede dioxiner var underestimerede og med mere end en faktor 100 for octachlordibenzodioxin (OCDD). Det blev konkluderet, at TGD-blad underestimerer bladkoncentrationen for meget fedtopløselige stoffer. Dette kan skyldes, at modellen ikke tager hensyn til deposition af partikler på bladene.

Schwartz sammenlignede også TGD-blad modellen med andre modeller. For samtlige simuleringer med dioxiner og furaner samt PCB var der en større afvigelse mellem beregnede og målte koncentrationer for Travis & Arms-ligningen end for TGD-blad modellen. De to modeller forudsagde sammenlignelige koncentrationer for OCDD, men afvigelserne fra de målte koncentrationer var meget store. Schwartz konkluderede, at brugen af biokoncentreringsfaktorer - som i Travis & Arms - ikke er tilstrækkelig for en lang række af stoffer. TGD-blad kan forbedres ved at indbygge betydningen af jordstænk og regndråber som optagelsesveje.

Trapp & Schwartz (2000) evaluerede TGD-blad modellen kritisk, og konkluderede, at i dens nuværende form er den kun anvendelig for en mindre del af organiske stoffer, og den er ikke anvendelig for dissocierende, ioniske polære og meget ikke-polære stoffer. Endvidere blev det vist, at i nogle tilfælde blev optaget underestimeret, da ikke alle relevante processer var taget i betragtning, f.eks. optaget fra jordstænk og regndråber.

#### 5.1.5 Versluijs et al.: Validering af TGD-rod og TGD-blad

Versluijs *et al.* (1998) konkluderede, at Briggs' regressionsudtryk og TGD-rod forudsiger koncentrationerne i rødderne på en meget sammenlignelig måde, samt at koncentrationen i rødderne for stoffer med meget høje  $\log K_{ow}$  bliver overestimeret af begge modeller. Dette skyldes sandsynligvis, at ligevægt i rødderne ikke har nået at indstille sig for de meget fedtopløselige stoffer i forsøgsperioden.

For den 'overjordiske' del blev TGD-blad modellen vurderet at være mere acceptabel end Briggs' relation. TGD-blad modellen underestimerede optaget af meget fedtopløselige stoffer i bladene, hvilket dog kunne forbedres stærkt ved at inkludere 1% jordstænk på bladene. Forfatterne foreslog derfor at addere for at tage højde for jordstænk, samt at sætte mængden af jordpartikler på bladene til 1%.

### 5.1.6 Andre

Collins (2001) sammenlignede Briggs' regressionsmodel med Mackay-fugacitetsmodellen og med PlantX-modellen, hvor PlantX resulterede i de bedste forudsigelser.

### 5.1.7 Opsummering af tidligere valideringsstudier

De fleste valideringsstudier har været foretaget for Briggs' og Travis & Arms' regressioner samt for TGD-rod og TGD-blad modellerne ved sammenligning af beregnede planteoptag med resultater fra laboratorie- og/eller markforsøg. Briggs' ligning og TGD-rod giver sammenlignelige resultater for rødder, hvor begge modeller overestimerer optaget af meget fedtopløselige stoffer i rødderne. Dette skyldes sandsynligvis, at ligevægt reelt ikke er opnået i målingerne. For de plantedele, der befinder sig over jorden, og for meget fedtopløselige stoffer underestimerer TGD-blad modellen koncentrationerne, hvilket sandsynligvis skyldes, at våd deposition og partikeldeposition fra luften samt jordstænk ikke er medtaget, samt måske fordi fordampning fra jorden ikke er inkluderet.

Endelig er det generelt anbefalet, at forskelle i plantekarakteristika mellem afgrøder inddrages i modellerne, da disse så i et vist omfang kan redegøre for forskelle i optaget mellem afgrøder.

## 5.2 Sammenligning af modellerne og målte data

Der er kun foretaget ganske få systematiske studier af planteoptaget af organiske stoffer fra forurenede jord med ældre forureninger. Følgende sammenligninger af modelberegningens resultater med eksperimentelle data er primært baseret på to datakilder.

Et dansk studie blev udført med det formål at vurdere betydningen af indholdet af PAH-forbindelser og metaller i frugt og grønt dyrket i forurenede jord under realistiske forhold. Undersøgelserne omfattede dyrkningsforsøg med grøntsager og indsamling af frugt, bær og nødder fra eksisterende træer og buske fra ikke-forurenede jord og jord med forskellige grader af forurening. For rodfrugter (kartoffel og gulerod) blev der analyseret prøver både med og uden skræl (Samsøe-Petersen *et al.* 2000, 2002).

I Nordrhein-Westfalen, Tyskland, er der et lysimeteranlæg nær Aachen. Gennem ca. 10 år har Delschen og en gruppe forskere (LUA Landesumweltamt Nordrhein-Westfalen, Soil Protection) udført studier af planteoptaget fra forurenede jord og af en lang række <sup>14</sup>C-mærkede PAH- og PCB-forbindelser. Data herfra er publiceret af Delschen *et al.* (1996, 1999). Rådata var tilgængelige for dette projekt. Kun data for naphthalen og benzo(a)pyren er inkluderet i dette arbejde.

Desværre er der ikke fundet tilgængelige data fra feltforsøg med flygtige stoffer, hvorfor beskrivelserne af eksponeringen via luften (fordampet stof) samt transporten i jordens og afgrødens luftfase ikke kan valideres.

### 5.2.1 'Underjordiske' afgrøder

BCF-værdier er beregnet (bilag H) for en række rodafgrøder (gulerødder, kartofler, roer, radiser) ved hjælp af modellerne: TGD-rod, Travis & Arms,

gulerodsmodellen, kartoffelmodellen samt ved ligevægtsbetragtninger, hvor ligning 16 i bilag C med de reelle rod karakteristika (vand-, lipid-, luft- og kulhydratindhold) er anvendt til beregning af rod-vand fordelingskoefficienten.

Målte og beregnede BCF-værdier (baseret på våd plantevægt) for PAH-forbindelser i en række rodafgrøder er sammenlignet i bilag H. Figur 5.1 giver et overblik over beregningsresultaterne og tabel 5.1 angiver følgende mål for overensstemmelsen mellem målte og beregnede værdier:

$$\text{Gnm. relativ standardafvigelse} = \frac{\sum \left( \frac{\ln(\text{BCF}_{\text{Målt},i}) - \ln(\text{BCF}_{\text{Beregnet},i})}{\ln(\text{BCF}_{\text{Målt},i})} \right)^2}{\text{antal målinger}} \quad \text{Ligning 37}$$

Som det fremgår af tabel 5.1, giver Travis & Arms umiddelbart den bedste overensstemmelse mellem målte og beregnede værdier. Hvad der imidlertid er lidt overraskende, er den meget lave korrelationskoefficient mellem de målte og Travis & Arms' beregnede BCF-værdier for rodafgrøderne, medens de af de øvrige modeller forudsagte BCF-værdier korrelerer bedre med de målte BCF-værdier. Kartoffelmodellen er ifølge tabel 5.1 den model, der giver den næstbedste overensstemmelse mellem målte og beregnede BCF-værdier, ligesom den kan forklare op til 44% af variationen mellem de målte BCF-værdier.

Det fremgår af figur 5.1, at modellerne tenderer mod at forudsige for høje BCF-værdier, men der er dog enkelte eksempler på, at modellerne underestimerer koncentrationen i rødderne, dog generelt med en faktor under 10. Dette forhold gør sig især gældende for Travis & Arms-modellen og i mindre omfang for gulerods- og kartoffelmodellerne. Generelt er BCF-værdierne for naphthalen meget overestimeret med en faktor på 10 eller mere. En årsag til dette kan være, at naphthalen metaboliseres i væsentligt omfang i planterne. Dette kan imidlertid ikke umiddelbart verificeres, da der ikke er fundet litteraturdata for metabolisering af naphthalen i planter. En anden årsag kan være analyseusikkerhed, idet naphthalen kan være delvist fordampet ved ekstraktionen før den kemiske analyse af planteprøverne.

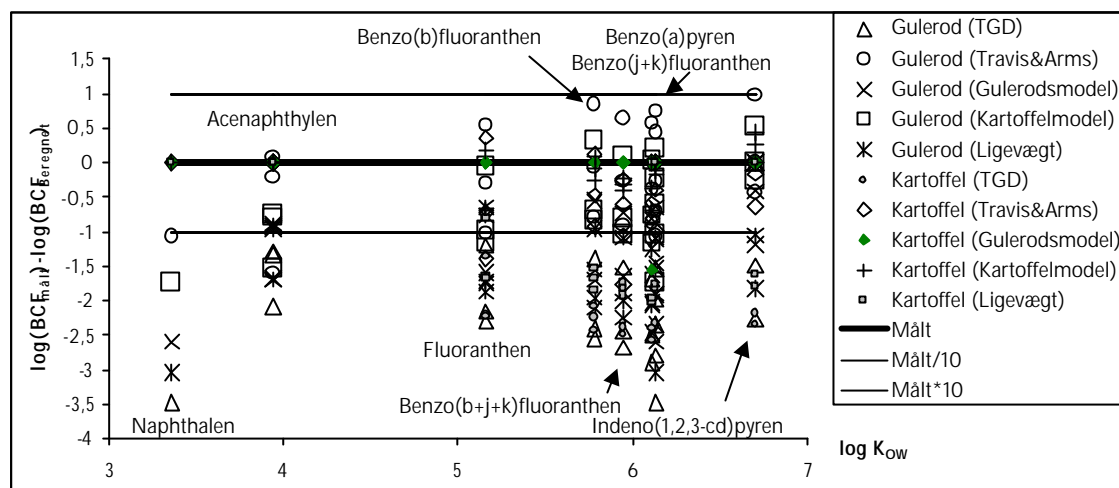
Tabel 5.1

Sammenligning mellem målte og beregnede værdier for rodafgrøders BCF-værdier for en række PAH-forbindelser

	TGD-rod	Travis & Arms	Gulerods-model	Kartoffel-model	Ligevægt
Gnm. standardafvigelse på ln (BCF) (ligning 37)	0,73	0,07	0,14	0,08	0,33
Korrelationskoefficient mellem målte og beregnede BCF-værdier	0,53	0,15	0,28	0,44	0,55
Antal målinger	41	43	24	39	39

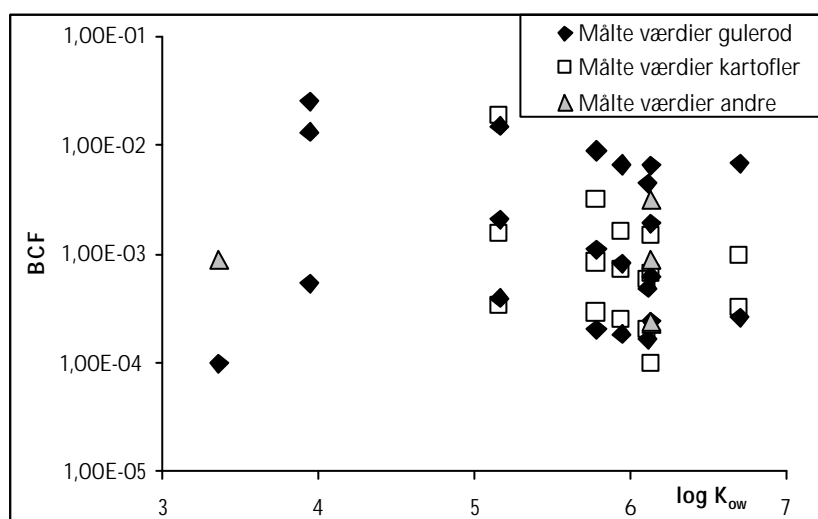
Da en stor del af de målte værdier stammer fra målinger i ældre forurenede jord, kan en anden væsentlig grund til, at BCF-værdierne generelt er overestimeret, skyldes ældning. I beregningerne er der som omtalt ikke taget hensyn til ældning, og det er tidligere blevet påvist, at ca. 50% af de hydrofobe stoffer (se kapitel 3) ikke forventes at være tilgængelig for planteoptag.

Forskellene på de BCF-værdier for benzo(a)pyren, der er beregnet ved hjælp af henholdsvis Travis & Arms, gulerodsmodellen og kartoffelmodellen, er generelt mindre end en faktor 10, og de er rimeligt tæt på de målte værdier. De to ligevægtsmetoder resulterer i en overestimering af BCF med flere størrelsesordener. Dette skyldes primært, at der ikke er opnået ligevægt mellem stofferne i de 'underjordiske' afgrøder og i jorden.



Figur 5.1 Sammenligning af målte og beregnede BCF-værdier for udvalgte PAH-forbindelser for en række rodafgrøder. Data fra bilag H.

Som det også fremgår af figur 5.2, hvor de målte BCF-værdier er afbildet som funktion af stoffernes  $\log K_{ow}$  og afgrødetype, er der stor variation mellem de målte BCF-værdier for de enkelte afgrødetyper og inden for hver af afgrødetyperne.

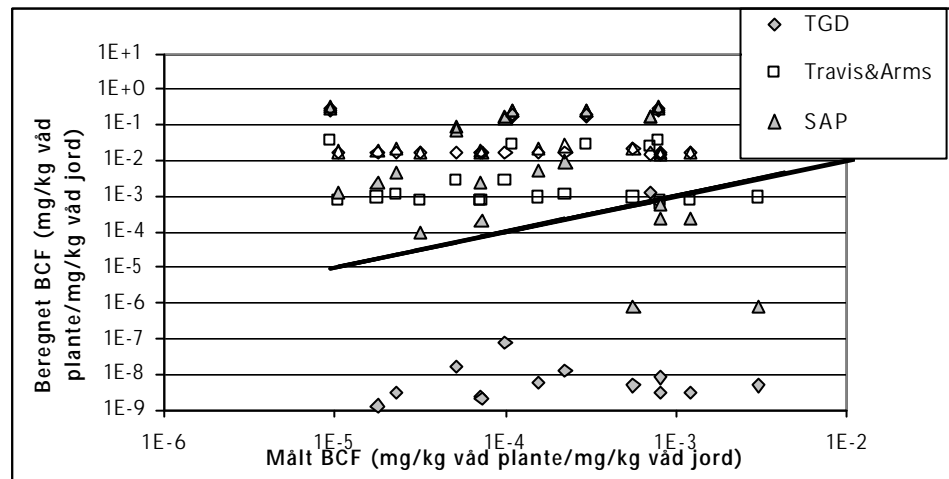


Figur 5.2 Målte BCF-værdier for PAH-forbindelser i forskellige rodafgrøder (kartoffel, gulerod, roe og radise) som funktion af  $\log K_{ow}$ . Data fra bilag H.

### 5.2.2 Bladafgrøder

Der er gennemført beregninger af koncentrationen af PAH-forbindelser i en række bladafgrøder (salat, spinat, grønkål, savoykål) ved hjælp af modellerne: TGD-blad (hvor både standardværdier og specifikke plantedata er anvendt), Travis & Arms samt SAP-modellen. Endvidere er eventuelt jordstænks bidrag til BCF-værdien angivet ved "+soil", hvor det her implicit er antaget, at alt stof transporteres fra jordstænkene ind i planten. Mængden af jordstænk på planten er hentet fra tabel 4.2.

Målte og beregnede BCF-værdier (baseret på vådvægt) for en række bladafgrøder er sammenlignet i bilag H. Figur 5.3 giver et overblik over beregningsresultaterne. Både TGD-blad og SAP-modellen overestimerer koncentrationen i bladene for naphthalen med flere størrelsesordner, men det kan (som tidligere nævnt) skyldes, at naphthalen bliver omsat i planten.



Figur 5.3  
Sammenligning mellem målte og beregnede BCF-værdier for PAH-forbindelser i bladafgrøder

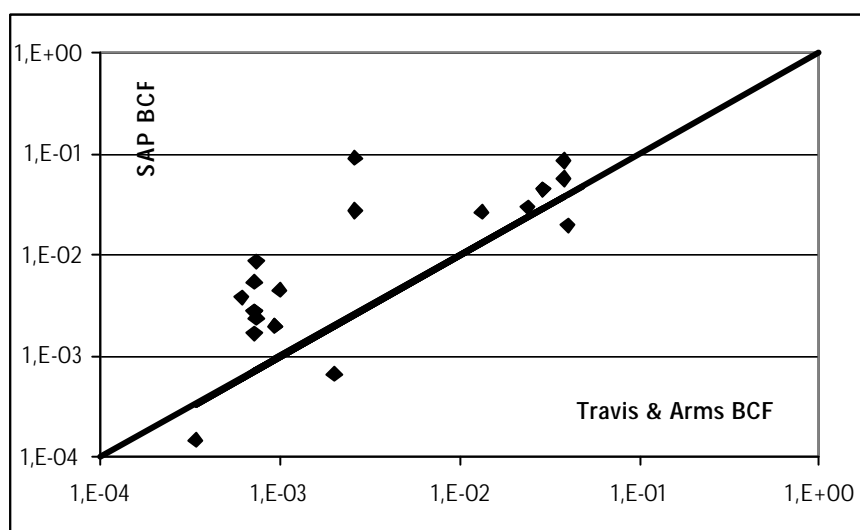
Tabel 5.2 angiver et mål for overensstemmelsen mellem målte og beregnede værdier (ligning 37).

Som det fremgår af tabel 5.2, giver de forskellige modeller bortset fra TGD-modellen stort set den samme afvigelse mellem målte og beregnede værdier. Hvad der imidlertid er lidt overraskende, er den meget lave korrelationskoefficient mellem de målte og beregnede BCF-værdier for samtlige modeller. Dette kan delvis forklares ved, at optaget i bladafgrøder er meget afhængigt af ydre, ikke modellerede omstændigheder, hvor f.eks. mængden af jord, der sætter sig på afgrøden er stærkt betinget af vejrforholdene, afgrødernes overflade samt højden af afgrøden. Delschen *et al.* (1999) viste således ved at udføre forsøg med et lag sand over den forurenede jord, at optaget af PAH i spinat og julesalat men ikke zucchini var stærkt betinget af jordstænk med PAH.

Tabel 5.2.  
Målte og beregnede værdier for bladafgrøders BCF

	TGD-blad	Travis & Arms	Soil	SAP	TGD-blad + soil	SAP+ soil
Gnm. standardafvigelse på ln (BCF) (ligning 37)	1,45	0,34	0,28	0,26	0,36	0,39
Korrelationskoefficient mellem målte og beregnede BCF-værdier	-0,10	-0,06	-0,06	-0,18	-0,12	-0,21
Antal målinger	18	23	19	18	17	17

Travis & Arms og SAP-modellen giver i mange tilfælde ret sammenlignelige (forskellen er en faktor ca. 10) beregnede BCF-værdier. Dette er illustreret i figur 5.4, hvor de beregnede BCF-værdier fra de to modeller er afbildet, så de ville ligge lige på den diagonale linie, hvis de var identiske. Begge modeller overestimerer koncentrationen i bladene for naphthalen, hvilket kan skyldes, at omsætning i planten ikke er med i modellerne.



Figur 5.4  
Sammenligning mellem resultater af SAP-modellen og Travis & Arms for PAH-forbindelser i bladafgrøder. Den diagonale linie viser, hvor resultaterne fra de to modeller ville være ens.

Det fremgår af figur 5.3, at TGD-blad generelt underestimerer koncentrationen i bladene (undtagen for naphthalen). Grunden til dette er nok den, at optag via jordstænk er en væsentlig optagelsesvej for de her undersøgte stoffer. Ved at inkludere jordstænksdataene fra tabel 4.2 opnås derimod generelt en overestimering af BCF-værdierne.

SAP-modellen, der også beregner optaget af dampformigt stof via bladene, resulterer i en væsentligt bedre overensstemmelse mellem målte og beregnede BCF-værdier. En af grundene til, at SAP-modellen i visse tilfælde underestimerer bladkoncentrationen, kan være, at optaget via jordstænk ikke er inkluderet i modellen. I de tilfælde, hvor SAP-modellen underestimerer bladkoncentrationen (nogle af forsøgene med salat og spinat), viser overslagsberegninger, at denne underestimering svarer til, at der ville være

mellem 0,001 og 0,07 g jord/g blad (gsm. 0,03 g/g) på bladene, samt at alt stof i jordstænkene var blevet optaget i bladene, som ikke er med i modellen. Til sammenligning kan det nævnes, at der for salat er målt jord på blade op til ca. 0,02 g våd jord/g våd plante.

### 5.2.3 Frugt og bær

De tilgængelige data for koncentrationer af miljøfremmede stoffer i frugt (Samsøe-Petersen *et al.* 2000) omfatter udelukkende PAH-forbindelser og kan ikke i alle tilfælde direkte relateres til de tilsvarende oplysninger om koncentrationer i jorden. Dette skyldes, at en del af planteprøverne var samleprøver fra flere arealer. Endvidere giver dataene ikke mulighed for vurdering af bidrag fra atmosfærisk afsætning på frugter og bær under modningen.

Til illustration af mulighederne for anvendelse af modeller til vurdering af optagelse i frugt og bær er der dog gennemført beregninger for æble, pære, hyben, stikkelsbær og blomme. I beregningerne er jordstænk ikke medtaget. Resultaterne viste, at den beregnede BCF-værdi for benzo(a)pyren i æble er en faktor 100 under den målte, medens den beregnede BCF for pære har samme størrelsesorden som den målte BCF for pære. Da der ikke umiddelbart er nogen grund til, at æbler skal have en højere BCF end pærer, kan dette forhold muligvis afspejle den store måleusikkerhed på BCF i frugtafgrøderne. Ellers er der generelt en pæn overensstemmelse mellem de beregnede og målte koncentrationer i frugt og bær, dvs. at forskellen er af størrelsesordenen en faktor 10 for de fleste.

### 5.3 Beskrivelse af anvendel ighed

Det kan konkluderes, at for de undersøgte stoffer giver Travis & Arms-modellen generelt en rimelig overensstemmelse mellem målte og beregnede BCF-værdier, og den kan derfor anvendes til en første screening af planteoptaget for denne type af stoffer. Usikkerheden i beregningen af BCF ved brug af Travis & Arms-modellen er ca. 1 størrelsesorden.

Gulerodsmodellen og kartoffelmodellen giver for PAH-forbindelserne overraskende nok sammenlignelige resultater for rodfrugterne. Kartoffelmodellen medtager ikke optagelse via vandoptag i rødder (men kun direkte kontakt med jorden), og gulerodsmodellen medtager ikke direkte kontakt med jorden.

Kartoffelmodellen bør derfor anvendes til kartofler og andre grøntsager, der er stængelknolde, mens der til egentlige rodafgrøder bør anvendes en kombination af kartoffel- og gulerodsmodellerne. Usikkerheden på beregningen af BCF for de lipofile stoffer er ca. 1 størrelsesorden, måske lidt lavere, når der tages højde for reduktionen i biotilgængeligheden ved ældning. For de mere vandopløselige stoffer forventes usikkerheden at være mindre, da der her med god rimelighed kan antages ligevægt mellem de 'underjordiske' afgrøder og jorden. Usikkerheden på beregningen af BCF stammer her primært fra den usikkerhed, der er forbundet med bestemmelsen af rod-vand fordelingskoefficient samt jord-vand fordelingskoefficienten.

For de undersøgte stoffer blev TGD-rod fundet at give alt for høje koncentrationer i rødderne, fordi der for disse fedtopløselige stoffer ikke er opnået ligevægt i feltundersøgelserne. Derfor kan modeller, der bygger på antagelse af ligevægt mellem kemikalier i jord og i rødder, ikke anvendes for



de fedtopløselige stoffer. For de mere vandopløselige stoffer er antagelsen om ligevægt rimelig, hvorfor ligevægtsmodellerne kan anvendes for denne type af stoffer.

For bladafgrøder synes SAP-modellen at give rimelige bestemmelser af koncentrationen. Modellen anbefales dog ikke anvendt, jf. diskussionen i kapitel 4. Til beregning af optaget i bladafgrøder i forbindelse med en risikovurdering er den bedste model TGD-blad, forudsat betydningen af jordstænk inkluderes, hvilket dog tilsyneladende medfører en overestimering af bladoptaget af PAH-forbindelserne. For de mere vandopløselige stoffer, vil betydningen af jordstænk være mindre betydningsfuldt, hvorfor TGD-blad i sig selv sandsynligvis er tilstrækkeligt præcis til beregning af BCF-værdierne (jf. de tidligere valideringsstudier).

Datagrundlaget for frugttræsmodellen er ikke tilstrækkeligt til en validering. Ud fra det meget spinkle datagrundlag synes modellen dog at give acceptable forudsigelser af BCF-værdier for frugt.



# 6 Udvalgelse af modeller og scenarier

Beregninger af optagelsen af miljøfremmede stoffer i planter, der dyrkes på arealer med forurenet jord, hvor der er lagt et lag ren jord ovenpå, baseres på følgende elementer: en model for optagelse, transport og omsætning af stoffer i planter, en model for stoffernes transport (inklusive tilgængelighed) i jorden samt beskrivelser af de afgrøder og jorde, der skal anvendes til vurderingen.

## 6.1 Planteoptagsmodeller

De kriterier, det er fundet væsentligt at inddrage i udvælgelsesprocessen af modellerne, omfatter både praktiske forhold og modellernes pålidelighed. Kriterierne omfatter:

- *Tilgængelighed*. Hvor nemt det er at få fat i modellen
- *Databehov*. Hvor omfattende modellens databehov er
- *Publiceret*. Hvorvidt modellen er publiceret
- *I brug*. Hvorvidt modellen er i brug
- *Testet og valideret*. Hvorvidt modellen er testet og valideret (med positivt resultat)
- *Programmeret*. Hvorvidt modellen er programmeret og med hvilket program
- *Anvendelig*. Hvorvidt modellen er anvendelig for de pågældende kemiske forbindelser.

### 6.1.1 Udvalgelsesproces for planteoptagsmodeller

Tabel 6.1 viser resultatet af anvendelsen af udvælgeskriterierne på de tidligere omtalte planteoptagsmodeller. De kriterier, der ikke er opfyldt, er kursiverede.

Nogle af modellerne kan ikke opfylde kriterierne, fordi de kræver for mange data, ikke er testet positive, ikke er i brug, eller ikke er publicerede. Følgende modeller "bestod":

- Travis & Arms
- TGD-rod (dog kun for de mere vandopløselige stoffer)
- TGD-blad (dog kun for de mere vandopløselige stoffer. For de fedtopløselige stoffer bør jordstænk medtages)
- Gulerodsmodellen
- Briggs' regressionsligning for rødder (dog kun for de mere vandopløselige stoffer)

Kartoffelmodellen "dumpede", bl.a. fordi den endnu ikke er publiceret. Modellen bør imidlertid undersøges nærmere, da den som den eneste model kan beskrive optaget af fedtopløselige stoffer i kartofler og lignende afgrøder. Kapitel 5 viste endvidere, at modellen er velegnet til beskrivelse af optaget af fedtopløselige stoffer i 'underjordiske' afgrøder.

Frugttræsmodellen "dumpede" ligeledes, fordi den endnu ikke er publiceret. Denne model bør også undersøges nærmere, da den som den eneste model kan beskrive optaget af stoffer i frugter. Kapitel 5 viste endvidere, at modellen synes at give acceptable beregninger af frugtoptaget.

Blandt de nævnte modeller er Briggs' regressionsligning og TGD-rod de mest udbredte, både hvad angår anvendelse og validering. Briggs' regressionsligning for rødder og ligevægtsfordelingskonstanten i TGD-rod er stort set identiske med den forskel, at TGD-rod giver mulighed for plantespecifik udvælgelse af inputparametrene. Briggs' regressionsligning og TGD-rod er dog kun velegnede for de mere vandopløselige stoffer. For de fedtopløselige stoffer holder forudsætningen om ligevægt ikke altid.

Beregningen for skud er forskellig, hvor TGD-blad har den fordel, at den kan medtage udveksling med luften. Vi har derfor valgt at gå videre med TGD-blad. Men da der er rapporteret en svaghed ved modellen for de fedtopløselige stoffer, inkluderes modellen for fastsiddende jordpartikler (jordstænk) i TGD-blad.

Tabel 6.1  
Udvælgelse af modeller

Model	Kriterie						
	Tilgængelighed	Databehov	Publiceret	I brug	Testet og valideret	Program	Anvendelig
Travis & Arms	ja	lavt	ja	ja	ja	regneark	ja
TGD-blad	ja	moderat	ja	ja	ja	regneark	ja for vandopløselige stoffer. For hydrofobe stoffer bør jordstænk tages med
TGD-rod	ja	lavt	ja	ja	ja	regneark	ja for de vandopløselige stoffer. For hydrofobe er der ikke ligevægt, hvorfor modellen ikke dur
Gulerodsmodel	ja	lavt	ja	nej	ja	regneark	ja
Kartoffelmodel	ja	lavt	nej	nej	nej (dog delvis i nærværende arbejde)	Fortran 77 og regneark (visual basic)	ja, dog ikke nødvendig; til de vandopløselige stoffer kan man også bruge gulerodsmodellen
SAP-transportmodel	ja	moderat	ja	nej	nej	regneark	ja
Frugttræsmodel	ja	lavt	nej	nej	nej (dog delvis i dette projekt)	regneark	ja
Briggs rødder	ja	lavt	ja	ja	ja	regneark	ja
Briggs skud	ja	lavt	ja	ja	nej	regneark	ja
SNAPS	ja	meget højt	ja	nej	ja	Fortran 77	ja
UTAB	(ja)	meget højt	ja	nej	(ja)	Fortran 77	ja
PlantX	ja	højt	ja	nej	ja	Fortran 77	ja
Mackay-model	ja	højt	ja	ja	ja	Basic	ja

## 6.2 Stoffernes bevægelse i jordsystemet

Modellering af stoffernes bevægelser i jorden omfatter fordelingen i jordens tre faser, herunder tilgængeligheden af stofferne, beskrivelse af de jorde, der indgår, samt modeller for transport af stofferne.

### 6.2.1 Beregning af koncentrationen i de tre faser

Som udgangspunkt anvendes stoffernes jord-vand fordelingskoefficient ( $K_D$ ) og luft-vand fordelingskoefficient ( $K_{AW}$ ) til beregning af fordelingen af stofferne i jordens tre faser: vand, luft og den faste matrice (ligningerne 4-7).

Der foretages kun beregninger med  $K_D$ -værdier, som beregnes ud fra deres log  $K_{ow}$  eller ud fra frisk-spiket jord. Til vurdering af ældningens betydning antages biotilgængeligheden at være 50% lavere end for spiket jord, hvorved BCF vil være en faktor 2 lavere i forurenede jorde end i nyspikede jorde.

### 6.2.2 Transport i jorden

De fundamentale ligninger til beskrivelse af transporten i jorden er baseret på en kombination af diffusiv og advektiv transport, og der er med dette projekts formål ingen grund til at finjustere på dem (f.eks. ved at inkorporere variationer i regnvand, temperatur m.v.). Da Jury-modellen er en analytisk løsning til differentilligningen med de rigtige grænsebetingelser, anvendes denne til beskrivelse af transporten i og fordampningen fra jorden.

### 6.2.3 Fordampning og koncentration i luften

I de tilfælde, hvor jorden er dækket med et lag ren jord, beregnes den gennemsnitlige koncentration i rodzonen ved Jury-modellen og denne koncentration benyttes til beregning af planteoptaget.

Til beregning af fordampningshastigheden anvendes Jury-modellen. Opblandingshøjden sættes til afgrødens højde, dvs. der antages en meget hurtig fortynding i luften over afgrøden. Herved anvendes en større opblandingshøjde end den højde, der oprindeligt er anvendt i Jury-modellen, men det formodes at være en rimelig antagelse, da luften mellem afgrødens blade forventes at være ret stillestående.

Gennemsnitskoncentrationen i luftlaget beregnes efter principperne i Jagg-modellen, dvs. den beregnes efter ligning 13, dog udskiftes opblandingshøjden  $Z$  med afgrødens højde. Standardværdien fra Jagg-modellen for længden på det udendørs forurenede område på 100 m samt for vindhastigheden (0,1 m/s) anvendes. Den beregnede, gennemsnitlige luftkoncentration indgår i beregningen af planteoptaget gennem bladene.

## 6.3 Udvalgelse af afgrøder

Til udvælgelse af modeller til beskrivelse af transporten af organiske stoffer er det som udgangspunkt relevant at betragte de afgrøder, der skal modelleres. Ved udvælgelse af afgrøderne er følgende taget i betragtning:

- de forskellige eksponeringsveje for optag i afgrøde skal være dækket ind
- de afgrøder, som enten indtages i store mængder eller som er velegnede som modelafgrøder for en række andre lignende afgrøder, er relevante. Blandt mulige kandidater inden for samme afgrødetype, vælges den afgrøde, som forventes at optage de relativt største mængder af stofferne.

De relevante eksponeringsveje for forskellige afgrøder er vist i tabel 2.1.

Tabel 6.2 viser konsum af de grøntsager, frugter og bær, der indgik i kostmodelberegningerne i det eksperimentelle projekt til undersøgelse af

optagelse af PAH'er og metaller i afgrøder (Samsøe-Petersen *et al.* 2000). Den væsentligste grøntsag er kartoffel med en andel på 58% af forbruget, efterfulgt af træfrugter (æble/pære) og andre rodfrugter som f.eks. gulerod, selleri og radise. De øvrige afgrøder, inkl. bønne, salat, kål og spinat, udgør tilsammen omkring 5%.

Tabel 6.2  
Konsum af udvalgte grøntsager, frugter og bær i Danmark (Samsøe-Petersen *et al.* 2000)

Type	Art	Konsum g/dag	Konsum %
Salat	Salat, grønkål, kinakål, spinat	7	3,2
Bønne	Bønne	2	0,92
Kartoffel	Kartoffel	126	58
Rodfrugter	Gulerod, selleri, radise	27	13
Træfrugter	Æble, pære, blomme, kirsebær, hyldebær	52	24
Bær	Ribs, solbær, hindbær, stikkelsbær	1-2	0,46-0,92
Nødder	Hasselnød	< 1	< 0,2

Tabel 6.3 viser de afgrøder, det på denne baggrund blev besluttet at anvende som modelafgrøder. Karakterisering af disse afgrøder er vist i bilag I.

Tabel 6.3. Udvalgte grøntsager

Afgrøde	Bemærkninger	Eksponeringsveje
Gulerod	Repræsentant for rodfrugter, har et forholdsvis højt lipidindhold	Diffusivt optag fra jorden Optag via jordvand
Grønkål	Repræsentant for bladafgrøder med lang vækstsæson. Grønkål har en lang vækstsæson (overvintret ofte), et relativt højt lipidindhold og høj eksponering for jordpartikler.	Optag fra luften Optag fra jordstænk på bladene
Salat	Repræsentant for bladafgrøder med kort vækstsæson. Vokser tæt på jorden, så der forventes høj eksponering via jordpartikler og stoffer i luften.	Optag fra luften Optag fra jordstænk på bladene
Frugttræ (nødder, æbler)	Nødder er valgt, da de har et højt tørstofindhold. Æbler er relevante, da de dyrkes og spises meget i Danmark.	Stofferne forventes primært transporteret via sivæv
Kartoffel	Spises i store mængder i Danmark. Kartofflen er endvidere en god modelgrøntsag for studier af betydningen af den diffusive transport fra jorden direkte ind i knolden, da alle andre eksponeringsveje forventes at være uden betydning.	Diffusivt optag fra jorden
Jordbær	Spises meget om sommeren. Da frugterne endvidere vokser tæt på jorden, forventes et relativt højt optag via jordstænk.	Optag fra luften Optag via jordpartikler på frugterne

#### 6.4 Udvalgte af jorde

Der udføres beregninger for to jorde: En jord med almindeligt og en jord med lavt indhold af organisk kulstof. Der gennemføres primært beregninger for

jorden med det almindelige indhold af organisk kulstof. Tabel 6.4 viser karakteriseringen af de to jorde, som er hentet fra Jagg-modellen.

Tabel 6.4  
Jordparametre

Jorde	$f_{oc}$ (kg/kg)	$V_v$ (L/L)	$V_L$ (L/L)	$d'$ (kg tør jord/L)
Jord 1	0,02	0,35	0,1	1,6
Jord 2	0,001	0,15	0,3	1,7





# 7 Beregningseksempler

## 7.1 Beregningsscenarier

Som skitseret i de foregående kapitler udføres beregninger for:

- *Stoffer*: MTBE, benzen, toluen, *n*-dodecan, trichlorethen, tetrachlorethen, naphthalen, benzo(a)pyren
- *Dæklag*: intet og et dæklag på 0,5 m. Ved beregninger med dæklag anvendes den gennemsnitlige koncentration i plantens roddebyde til beregning af den mængde, der suges op sammen med vandet, mens den gennemsnitlige koncentration i det lag, hvor rodfrugten ligger, anvendes ved beregninger af den diffusive transport ind i roden, og den gennemsnitlige koncentration i overladelaget (her sat til 2 cm) anvendes ved jordstænk. Koncentrationen i overladelaget skal benyttes til at vurdere betydningen af jordstænk på afgrøderne, når der er lagt et 0,5 m tykt lag ren jord over den forurenede jord. Resultatet af disse beregninger er tre faktorer ( $f_{\text{roddebyde}}$ ,  $f_{\text{rodfrugt}}$ ,  $f_{\text{jordstænk}}$ ), der for hver af de tre situationer angiver den faktor, jordkoncentrationen reduceres med ved anvendelse af et dæklag. Beregningerne udføres efter 1 år og efter 10 år.
- *Ældning*: der tages ikke hensyn til ældning, men betydningen diskuteres kort
- *Afgrøder*: kartofler, gulerødder, salat, grønkål, æbler, bær på buske, jordbær, nødder

For rodafgrøder foretages beregninger med kartoffelmodellen samt for gulerødder også med gulerodsmodellen, hvor den højeste af de to beregnede BCF-værdier derefter anvendes. Endelig anvendes TGD-rod også.

For bladafgrøder foretages beregninger med TGD-blad, hvor der både tages højde for jordstænk og ses bort fra jordstænk.

For bær anvendes frugttræsmodellen, hvor der endvidere gennemføres modelberegninger både med og uden jordstænk for jordbær. For de øvrige frugter ses der bort fra jordstænk.

Ovennævnte beregninger udføres ved en "standardkoncentration" af stoffet i jorden på 1 mg/kg tør vægt, hvor stoffernes jord-vand fordelingskoefficient uden ældning anvendes. De herved beregnede BCF-værdier benævnes herefter med  $BCF_{\text{Standard}}$ . Hvis den forurenede jord er dækket med et lag ren jord, ganges  $BCF_{\text{Standard}}$  med den faktor, der tager hensyn til betydningen af et lag ren jord over det forurenede jordlag ( $f_{\text{roddebyde}}$ ,  $f_{\text{rodfrugt}}$ ,  $f_{\text{jordstænk}}$ ).

For hvert stof findes den spiselige afgrøde, der vil give den højeste daglige indtagelse af stoffet, når koncentrationen i planten kombineres med det gennemsnitlige daglige indtag af afgrøden. For denne afgrøde gennemføres beregninger med de jordkoncentrationer, som er angivet i tabel 7.1. Disse jordkoncentrationer er som udgangspunkt fastlagt som den jordkoncentration af et stof, hvor afdampningskriteriet over terræn lige netop er nået. Forureningen er antaget at ligge 0,5 m eller 2,0 m under terræn. Hvis den

således definerede jordkoncentration er over jordkvalitetskriteriet, er jordkvalitetskriteriet dog anvendt i beregningerne.

Tabel 7.1

Stofkoncentrationer i jorden (mg/kg tør jord). De koncentrationer, der indgår i beregningerne, er mærket med en \*

Stof	Afdampningskriterie mg/m <sup>3</sup>	Kilde: 0,5 m.u.t.		Kilde: 2 m.u.t.		JKK mg/kg
		Friarealer	Hus	Friarealer	Hus	
		mg/kg	mg/kg	mg/kg	mg/kg	
Benzo(a)pyren	-	-	-	-	-	0,1*
MTBE	0,03	17,1*	5·10 <sup>-2</sup>	19,7	0,1	-
Naphthalen	0,04	165,3	0,4	190,5	1	1,5 <sup>1)</sup> *
n-Dodecan	0,6 <sup>2)</sup>	80,0*	0,2	92,0	0,5	100 <sup>3)</sup>
Trichlorethen	0,001	0,6*	2·10 <sup>-4</sup>	0,8	4·10 <sup>-4</sup>	5
Tetrachloreten	0,006	3,8*	1·10 <sup>-3</sup>	4,4	3·10 <sup>-3</sup>	5
Toluen	0,4	404,4	0,1	465,1	0,3	10*
Benzen	0,00013	0,1*	3·10 <sup>-5</sup>	0,1	6·10 <sup>-5</sup>	1,5

<sup>1)</sup> JKK gælder for summen af følgende PAH-forbindelser: benzo(a)pyren, benzo(b+j+k)fluoranthen, dibenzo(a,h)anthracen, fluoranthen og indeno(1,2,3-cd)pyren. Naphthalen indgår ikke denne sum, men da naphthalen er udvalgt som et modelstof for PAH-forbindelserne, anvendes dette JKK

<sup>2)</sup> Afdampningskriterie for alifater (oplyst fra Miljøstyrelsen)

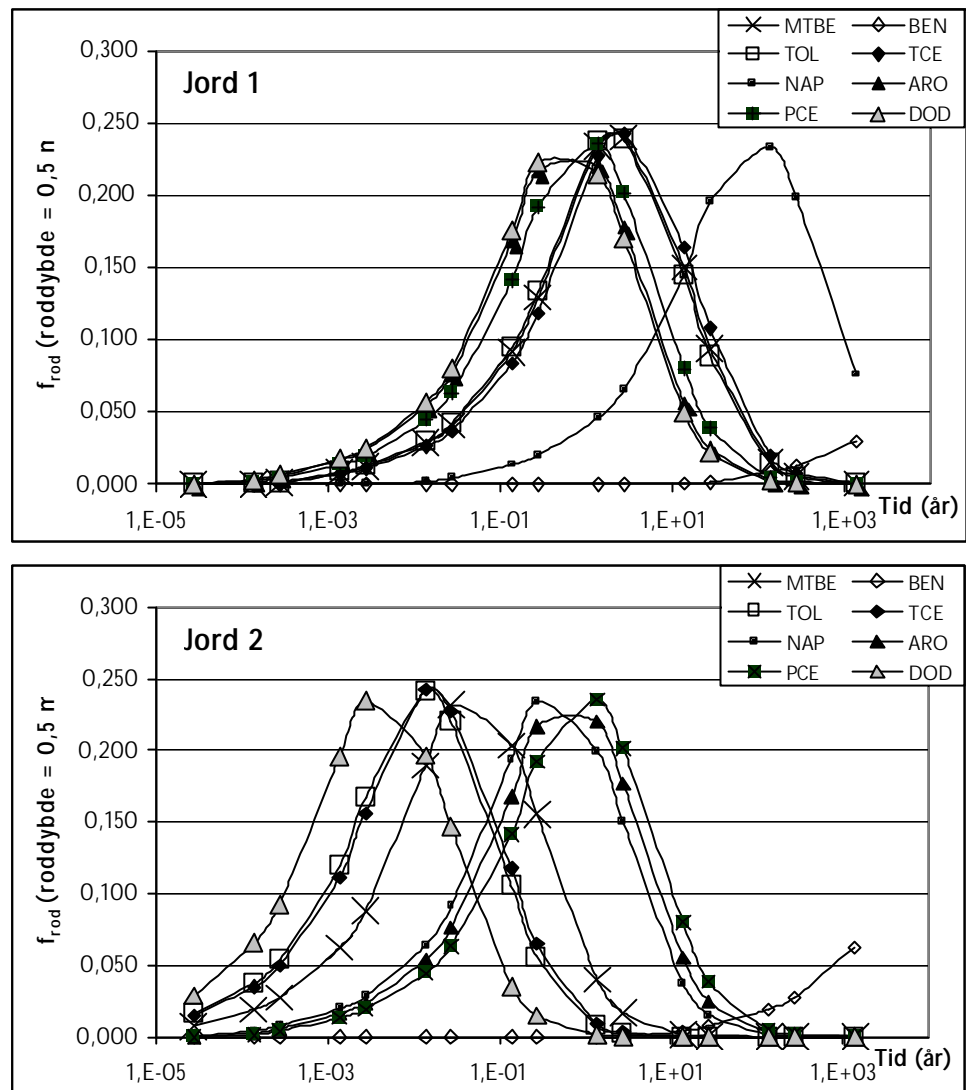
<sup>3)</sup> n-dodecan: JKK for gasolie

## 7.2 Beregningsresultater

### 7.2.1 Betydning af jorddække

Figur 7.1 viser den faktor, hvormed den gennemsnitlige jordkoncentration i rodzonen (der er antaget at være 0,5 m) reduceres ved anvendelse af et dæklag på 0,5 m. Tykkelsen på det forurenede lag er antaget at være 2,5 m. Det fremgår, at koncentrationen af de undersøgte stoffer i det øverste lag reduceres med mindst 75%, når der anvendes et dæklag. Det fremgår, at transporten af stofferne fra det forurenede lag er hurtigst i den jord, der kun indeholder meget lidt organisk kulstof (jord 2). Det fremgår endvidere, at koncentrationen af de mest flygtige stoffer (dodecan, trichlorethen, toluen) topper væsentligt hurtigere end naphthalen og benzo(a)pyren, hvor især det sidstnævnte stof kun meget langsomt transporteres op til rodzonen.

Efter ca. 10 år er alle stoffer undtagen benzo(a)pyren fordampet fra den forurenede jord 2, hvor der i jord 1 stadig vil være væsentlige mængder forurening tilbage i jorden. Først efter ca. 100 år er alle stoffer undtagen naphthalen og benzo(a)pyren fordampet fra jorden, og efter ca. 1000 år vil naphthalen være dampet af fra jorden, mens der stadig vil være benzo(a)pyren tilbage.



Figur 7.1

Beregning af fordampning fra forurenede jord med dæklag af ren jord  
 MTBE = MTBE, BEN = benzo(a)pyren, TOL = toluen, TCE = trichlorethen, NAP = naphthalen, ARO = benzen, PCE = tetrachlorethen, DOD = n-dodecan.

### 7.2.2 Beregnede BCF-værdier

Tabel 7.2a og b viser de beregnede BCF-værdier, indtaget af de otte stoffer (ved en standardkoncentration i jorden på 1 mg/kg tørstof), samt hvilke afgrøder, der potentielt giver den største indtagelse med kosten (via afgrøder), hvor kostindtaget vist i tabel 6.2 er benyttet. For beregninger med dæklag er BCF beregnet som koncentrationen i planten divideret med startkoncentrationen i den forurenede del af jorden. Begge standardjorde er anvendt i beregningerne. Dæklagets tykkelse er sat til 0,5 m. De anvendte plantedata fremgår af bilag I.

Den mest kritiske afgrøde, det vil sige den afgrøde, hvor den estimerede daglige indtagelse af stoffet er højest, er markeret med ramme i tabel 7.2a (jord 1) og tabel 7.2b (jord 2).

Tabel 7.2a

Indtagelse af stoffer via afgrøder ( $\mu\text{g}/\text{dag}$ ) dyrket i jord med en standardkoncentration på  $1 \text{ mg}/\text{kg}$  tør vægt. Jord 1 er anvendt i beregningerne. BCF er angivet i parentes. For beregninger med dæklag er BCF beregnet som koncentrationen i planten divideret med startkoncentrationen i den forurenede jord. Dæklagets tykkelse er sat til 0,5 m. De anvendte plantedata fremgår af bilag I.

Stof	Dæklag	Bladafgrøde	Kartoffel	Anden rodfrugt	Kartoffel u. skræl	Anden rodfrugt u. skræl	Frugt	Nød
Naphthalen	Uden dæklag	1,4 (1,9·10 <sup>-1</sup> )	18,1 (1,4·10 <sup>-1</sup> )	5,7 (2,1·10 <sup>-1</sup> )	17,4 (1,4·10 <sup>-1</sup> )	5,7 (2,1·10 <sup>-1</sup> )	3,5 (6,7·10 <sup>-2</sup> )	0,4 (4,4·10 <sup>-1</sup> )
Benzo(a)pyren	Uden dæklag	0,3 (4,7·10 <sup>-2</sup> )	0,2 (1,8·10 <sup>-3</sup> )	1,1 (3,9·10 <sup>-2</sup> )	0,0 (2,9·10 <sup>-5</sup> )	1,1 (3,9·10 <sup>-2</sup> )	0,0 (1,1·10 <sup>-8</sup> )	0,0 (7,2·10 <sup>-8</sup> )
MTBE	Uden dæklag	0,6 (8,4·10 <sup>-2</sup> )	251,9 (2,0)	58,4 (2,2)	248,6 (2,0)	58,4 (2,2)	47,0 (9,0·10 <sup>-1</sup> )	6,0 (6,0)
Toluen	Uden dæklag	0,5 (6,8·10 <sup>-2</sup> )	42,6 (3,4·10 <sup>-1</sup> )	9,6 (3,6·10 <sup>-1</sup> )	42,6 (3,4·10 <sup>-1</sup> )	9,6 (3,6·10 <sup>-1</sup> )	17,9 (3,4·10 <sup>-1</sup> )	2,3 (2,3)
n-Dodecan	Uden dæklag	0,5 (6,7·10 <sup>-2</sup> )	12,6 (1,0·10 <sup>-1</sup> )	3,7 (1,4·10 <sup>-1</sup> )	12,6 (1,0·10 <sup>-1</sup> )	3,7 (1,4·10 <sup>-1</sup> )	0,0 (1,5·10 <sup>-7</sup> )	0,0 (9,9·10 <sup>-7</sup> )
Trichlorethen	Uden dæklag	0,5 (6,8·10 <sup>-2</sup> )	34,1 (2,7·10 <sup>-1</sup> )	7,7 (2,8·10 <sup>-1</sup> )	34,1 (2,7·10 <sup>-1</sup> )	7,7 (2,8·10 <sup>-1</sup> )	9,1 (1,7·10 <sup>-1</sup> )	1,2 (1,2)
Benzen	Uden dæklag	0,4 (6,0·10 <sup>-2</sup> )	95,9 (7,6·10 <sup>-1</sup> )	20,2 (7,5·10 <sup>-1</sup> )	95,9 (7,6·10 <sup>-1</sup> )	20,2 (7,5·10 <sup>-1</sup> )	48,5 (9,3·10 <sup>-1</sup> )	6,2 (6,2)
Tetrachlorethen	Uden dæklag	0,4 (5,8·10 <sup>-2</sup> )	37,5 (3,0·10 <sup>-1</sup> )	8,8 (3,2·10 <sup>-1</sup> )	37,5 (3,0·10 <sup>-1</sup> )	8,8 (3,2·10 <sup>-1</sup> )	13,5 (2,6·10 <sup>-1</sup> )	1,7 (1,7)
Naphthalen	Dæklag 1 år	0,0 (2,5·10 <sup>-8</sup> )	0,0 (1,2·10 <sup>-7</sup> )	2,0 (7,4·10 <sup>-2</sup> )	0,0 (1,1·10 <sup>-7</sup> )	2,0 (7,4·10 <sup>-2</sup> )	2,6 (5,0·10 <sup>-2</sup> )	0,3 (3,3·10 <sup>-1</sup> )
Benzo(a)pyren	Dæklag 1 år	0,0 (1,5·10 <sup>-9</sup> )	0,0 (0,0)	0,5 (2,0·10 <sup>-2</sup> )	0,0 (0,0)	0,5 (2,0·10 <sup>-2</sup> )	0,0 (8,2·10 <sup>-9</sup> )	0,0 (5,4·10 <sup>-8</sup> )
MTBE	Dæklag 1 år	0,0 (7,2·10 <sup>-4</sup> )	29,4 (2,3·10 <sup>-1</sup> )	3,4 (1,3·10 <sup>-1</sup> )	29,4 (2,3·10 <sup>-1</sup> )	3,4 (1,3·10 <sup>-1</sup> )	34,9 (6,7·10 <sup>-1</sup> )	4,4 (4,4)
Toluen	Dæklag 1 år	0,0 (4,5·10 <sup>-4</sup> )	5,1 (4,1·10 <sup>-2</sup> )	2,2 (8,2·10 <sup>-2</sup> )	5,1 (4,1·10 <sup>-2</sup> )	2,2 (8,2·10 <sup>-2</sup> )	13,3 (2,6·10 <sup>-1</sup> )	1,7 (1,7)
n-Dodecan	Dæklag 1 år	0,1 (9,0·10 <sup>-3</sup> )	1,8 (1,4·10 <sup>-2</sup> )	0,7 (2,7·10 <sup>-2</sup> )	1,8 (1,4·10 <sup>-2</sup> )	0,7 (2,7·10 <sup>-2</sup> )	0,0 (1,0·10 <sup>-7</sup> )	0,0 (6,7·10 <sup>-7</sup> )
Trichlorethen	Dæklag 1 år	0,1 (1,1·10 <sup>-2</sup> )	3,6 (2,8·10 <sup>-2</sup> )	2,3 (8,4·10 <sup>-2</sup> )	3,6 (2,8·10 <sup>-2</sup> )	2,3 (8,4·10 <sup>-2</sup> )	6,8 (1,3·10 <sup>-1</sup> )	0,9 (8,6·10 <sup>-1</sup> )
Benzen	Dæklag 1 år	0,0 (6,0·10 <sup>-3</sup> )	13,6 (1,1·10 <sup>-1</sup> )	2,4 (9,1·10 <sup>-2</sup> )	13,6 (1,1·10 <sup>-1</sup> )	2,4 (9,1·10 <sup>-2</sup> )	33,1 (6,4·10 <sup>-1</sup> )	4,2 (4,2)
Tetrachlorethen	Dæklag 1 år	0,0 (5,3·10 <sup>-3</sup> )	5,5 (4,3·10 <sup>-2</sup> )	2,1 (7,9·10 <sup>-2</sup> )	5,5 (4,3·10 <sup>-2</sup> )	2,1 (7,9·10 <sup>-2</sup> )	9,6 (1,8·10 <sup>-1</sup> )	1,2 (1,2)
Naphthalen	Dæklag 10 år	0,0 (1,8·10 <sup>-5</sup> )	0,4 (3,5·10 <sup>-3</sup> )	2,0 (7,4·10 <sup>-2</sup> )	0,4 (3,4·10 <sup>-3</sup> )	2,0 (7,4·10 <sup>-2</sup> )	2,6 (5,0·10 <sup>-2</sup> )	0,3 (3,3·10 <sup>-1</sup> )
Benzo(a)pyren	Dæklag 10 år	0,0 (1,5·10 <sup>-9</sup> )	0,0 (0,0)	0,5 (2,0·10 <sup>-2</sup> )	0,0 (0,0)	0,5 (2,0·10 <sup>-2</sup> )	0,0 (8,2·10 <sup>-9</sup> )	0,0 (5,4·10 <sup>-8</sup> )
MTBE	Dæklag 10 år	0,0 (6,0·10 <sup>-4</sup> )	26,6 (2,1·10 <sup>-1</sup> )	3,3 (1,2·10 <sup>-1</sup> )	26,2 (2,1·10 <sup>-1</sup> )	3,3 (1,2·10 <sup>-1</sup> )	25,1 (4,8·10 <sup>-1</sup> )	3,2 (3,2)
Toluen	Dæklag 10 år	0,0 (3,9·10 <sup>-4</sup> )	4,4 (3,5·10 <sup>-2</sup> )	1,4 (5,3·10 <sup>-2</sup> )	4,4 (3,5·10 <sup>-2</sup> )	1,4 (5,3·10 <sup>-2</sup> )	9,3 (1,8·10 <sup>-1</sup> )	1,2 (1,2)
n-Dodecan	Dæklag 10 år	0,0 (2,8·10 <sup>-3</sup> )	0,5 (4,2·10 <sup>-3</sup> )	0,2 (8,3·10 <sup>-3</sup> )	0,5 (4,2·10 <sup>-3</sup> )	0,2 (8,3·10 <sup>-3</sup> )	0,0 (3,5·10 <sup>-8</sup> )	0,0 (2,3·10 <sup>-7</sup> )
Trichlorethen	Dæklag 10 år	0,1 (7,7·10 <sup>-3</sup> )	3,8 (3,1·10 <sup>-2</sup> )	1,6 (5,9·10 <sup>-2</sup> )	3,8 (3,1·10 <sup>-2</sup> )	1,6 (5,9·10 <sup>-2</sup> )	5,2 (9,9·10 <sup>-2</sup> )	0,7 (6,6·10 <sup>-1</sup> )
Benzen	Dæklag 10 år	0,0 (2,0·10 <sup>-3</sup> )	4,4 (3,5·10 <sup>-2</sup> )	0,8 (3,0·10 <sup>-2</sup> )	4,4 (3,5·10 <sup>-2</sup> )	0,8 (3,0·10 <sup>-2</sup> )	12,4 (2,4·10 <sup>-1</sup> )	1,6 (1,6)
Tetrachlorethen	Dæklag 10 år	0,0 (2,3·10 <sup>-3</sup> )	2,4 (1,9·10 <sup>-2</sup> )	0,9 (3,4·10 <sup>-2</sup> )	2,4 (1,9·10 <sup>-2</sup> )	0,9 (3,4·10 <sup>-2</sup> )	4,6 (8,8·10 <sup>-2</sup> )	0,6 (5,8·10 <sup>-1</sup> )

Tabel 7.2b

Indtagelse af stoffer via afgrøder ( $\mu\text{g}/\text{dag}$ ) dyrket i jord med en standardkoncentration på  $1 \text{ mg}/\text{kg}$  tør vægt. Jord 2 er anvendt i beregningerne. BCF er angivet i parentes. For beregninger med dæklag er BCF beregnet som koncentrationen i planten divideret med startkoncentrationen i den forureneede jord. Dæklagets tykkelse er sat til 0,5 m. De anvendte plantedata fremgår af bilag I.

Stof	Dæklag	Bladafgrøde	Kartoffel	Anden rodfrugt	Kartoffel u. skræl	Anden rodfrugt u. skræl	Frugt	Nød
Naphthalen	Uden dæklag	17,4 (2,5)	323,4 (2,6)	101,9 (3,8)	310,7 (2,5)	101,5 (3,8)	62,0 (1,2)	7,9 (7,9)
Benzo(a)pyren	Uden dæklag	0,3 ( $4,7 \cdot 10^{-2}$ )	4,6 ( $3,7 \cdot 10^{-2}$ )	21,6 ( $8,0 \cdot 10^{-1}$ )	0,1 ( $5,7 \cdot 10^{-4}$ )	21,6 ( $8,0 \cdot 10^{-1}$ )	0,0 ( $2,2 \cdot 10^{-7}$ )	0,0 ( $1,4 \cdot 10^{-6}$ )
MTBE	Uden dæklag	3,3 ( $4,7 \cdot 10^{-1}$ )	1065,6 (8,5)	246,9 (9,1)	1051,3 (8,3)	246,9 (9,1)	198,7 (3,8)	25,2 (25)
Toluen	Uden dæklag	2,5 ( $3,6 \cdot 10^{-1}$ )	561,8 (4,5)	127,1 (4,7)	561,8 (4,5)	127,1 (4,7)	236,1 (4,5)	30,0 (30)
n-Dodecan	Uden dæklag	2,2 ( $3,2 \cdot 10^{-1}$ )	136,7 (1,1)	40,4 (1,5)	136,7 (1,1)	40,4 (1,5)	0,0 ( $1,6 \cdot 10^{-6}$ )	0,0 ( $1,1 \cdot 10^{-5}$ )
Trichlorethen	Uden dæklag	2,7 ( $3,8 \cdot 10^{-1}$ )	498,0 (4,0)	112,5 (4,2)	498,0 (4,0)	112,5 (4,2)	133,0 (2,6)	16,9 (17)
Benzen	Uden dæklag	1,4 ( $1,9 \cdot 10^{-1}$ )	769,4 (6,1)	161,9 (6,0)	769,4 (6,1)	161,9 (6,0)	389,0 (7,5)	49,4 (49)
Tetrachlorethen	Uden dæklag	1,4 ( $1,9 \cdot 10^{-1}$ )	419,2 (3,3)	97,8 (3,6)	419,2 (3,3)	97,8 (3,6)	150,9 (2,9)	19,2 (19)
Naphthalen	Dæklag 1 år	0,2 ( $2,2 \cdot 10^{-2}$ )	42,8 ( $3,4 \cdot 10^{-1}$ )	29,8 (1,1)	41,1 ( $3,3 \cdot 10^{-1}$ )	29,8 (1,1)	40,0 ( $7,7 \cdot 10^{-1}$ )	5,1 (5,1)
Benzo(a)pyren	Dæklag 1 år	0,0 ( $3,1 \cdot 10^{-9}$ )	0,0 (0,0)	10,8 ( $4,0 \cdot 10^{-1}$ )	0,0 (0,0)	10,8 ( $4,0 \cdot 10^{-1}$ )	0,0 ( $1,6 \cdot 10^{-7}$ )	0,0 ( $1,1 \cdot 10^{-6}$ )
MTBE	Dæklag 1 år	0,0 ( $1,7 \cdot 10^{-3}$ )	36,5 ( $2,9 \cdot 10^{-1}$ )	4,5 ( $1,7 \cdot 10^{-1}$ )	36,5 ( $2,9 \cdot 10^{-1}$ )	4,5 ( $1,7 \cdot 10^{-1}$ )	39,0 ( $7,5 \cdot 10^{-1}$ )	5,0 (5,0)
Toluen	Dæklag 1 år	0,0 ( $7,5 \cdot 10^{-5}$ )	3,8 ( $3,0 \cdot 10^{-2}$ )	1,3 ( $4,9 \cdot 10^{-2}$ )	3,8 ( $3,0 \cdot 10^{-2}$ )	1,3 ( $4,9 \cdot 10^{-2}$ )	10,2 ( $2,0 \cdot 10^{-1}$ )	1,3 (1,3)
n-Dodecan	Dæklag 1 år	0,0 ( $1,3 \cdot 10^{-3}$ )	0,2 ( $1,6 \cdot 10^{-3}$ )	0,1 ( $3,2 \cdot 10^{-3}$ )	0,2 ( $1,6 \cdot 10^{-3}$ )	0,1 ( $3,2 \cdot 10^{-3}$ )	0,0 ( $1,6 \cdot 10^{-6}$ )	0,0 ( $1,0 \cdot 10^{-7}$ )
Trichlorethen	Dæklag 1 år	0,1 ( $9,1 \cdot 10^{-3}$ )	4,1 ( $3,3 \cdot 10^{-2}$ )	1,8 ( $6,7 \cdot 10^{-2}$ )	4,1 ( $3,3 \cdot 10^{-2}$ )	1,8 ( $6,7 \cdot 10^{-2}$ )	6,9 ( $1,3 \cdot 10^{-1}$ )	0,9 ( $8,8 \cdot 10^{-1}$ )
Benzen	Dæklag 1 år	0,0 ( $1,3 \cdot 10^{-3}$ )	2,0 ( $1,6 \cdot 10^{-2}$ )	0,4 ( $1,4 \cdot 10^{-2}$ )	2,0 ( $1,6 \cdot 10^{-2}$ )	0,4 ( $1,4 \cdot 10^{-2}$ )	6,6 ( $1,3 \cdot 10^{-1}$ )	0,8 ( $8,4 \cdot 10^{-1}$ )
Tetrachlorethen	Dæklag 1 år	0,0 ( $1,3 \cdot 10^{-3}$ )	1,1 ( $9,1 \cdot 10^{-3}$ )	0,5 ( $1,7 \cdot 10^{-2}$ )	1,1 ( $9,1 \cdot 10^{-3}$ )	0,5 ( $1,7 \cdot 10^{-2}$ )	2,7 ( $5,2 \cdot 10^{-2}$ )	0,3 ( $3,4 \cdot 10^{-1}$ )
Naphthalen	Dæklag 10 år	0,0 ( $1,4 \cdot 10^{-3}$ )	10,3 ( $8,2 \cdot 10^{-2}$ )	7,5 ( $2,8 \cdot 10^{-1}$ )	9,9 ( $7,9 \cdot 10^{-2}$ )	7,5 ( $2,8 \cdot 10^{-1}$ )	40,0 ( $7,7 \cdot 10^{-1}$ )	1,5 (1,5)
Benzo(a)pyren	Dæklag 10 år	0,0 ( $3,1 \cdot 10^{-9}$ )	0,0 (0,0)	10,8 ( $4,0 \cdot 10^{-1}$ )	0,0 (0,0)	10,8 ( $4,0 \cdot 10^{-1}$ )	0,0 ( $1,6 \cdot 10^{-7}$ )	0,0 ( $1,1 \cdot 10^{-6}$ )
MTBE	Dæklag 10 år	0,0 ( $9,0 \cdot 10^{-6}$ )	1,8 ( $1,4 \cdot 10^{-2}$ )	0,2 ( $8,1 \cdot 10^{-3}$ )	1,7 ( $1,4 \cdot 10^{-2}$ )	0,2 ( $8,1 \cdot 10^{-3}$ )	2,2 ( $4,2 \cdot 10^{-2}$ )	0,3 ( $2,7 \cdot 10^{-1}$ )
Toluen	Dæklag 10 år	0,0 ( $7,9 \cdot 10^{-7}$ )	0,1 ( $1,1 \cdot 10^{-3}$ )	0,0 ( $1,8 \cdot 10^{-3}$ )	0,1 ( $1,1 \cdot 10^{-3}$ )	0,0 ( $1,8 \cdot 10^{-3}$ )	0,4 ( $7,4 \cdot 10^{-3}$ )	0,0 ( $4,9 \cdot 10^{-2}$ )
n-Dodecan	Dæklag 10 år	0,0 ( $4,3 \cdot 10^{-5}$ )	0,0 ( $5,1 \cdot 10^{-5}$ )	0,0 ( $1,1 \cdot 10^{-4}$ )	0,0 ( $5,1 \cdot 10^{-5}$ )	0,0 ( $1,1 \cdot 10^{-4}$ )	0,0 ( $5,2 \cdot 10^{-10}$ )	0,0 ( $3,4 \cdot 10^{-9}$ )
Trichlorethen	Dæklag 10 år	0,0 ( $3,3 \cdot 10^{-4}$ )	0,1 ( $1,2 \cdot 10^{-3}$ )	0,1 ( $2,5 \cdot 10^{-3}$ )	0,1 ( $1,2 \cdot 10^{-3}$ )	0,1 ( $2,5 \cdot 10^{-3}$ )	0,3 ( $5,1 \cdot 10^{-3}$ )	0,0 ( $3,4 \cdot 10^{-2}$ )
Benzen	Dæklag 10 år	0,0 ( $4,4 \cdot 10^{-5}$ )	0,1 ( $5,4 \cdot 10^{-4}$ )	0,0 ( $4,9 \cdot 10^{-4}$ )	0,1 ( $5,4 \cdot 10^{-4}$ )	0,0 ( $4,9 \cdot 10^{-4}$ )	0,2 ( $4,4 \cdot 10^{-3}$ )	0,0 ( $2,9 \cdot 10^{-2}$ )
Tetrachlorethen	Dæklag 10 år	0,0 ( $4,6 \cdot 10^{-5}$ )	0,0 ( $3,1 \cdot 10^{-4}$ )	0,0 ( $5,9 \cdot 10^{-4}$ )	0,0 ( $3,1 \cdot 10^{-4}$ )	0,0 ( $5,9 \cdot 10^{-4}$ )	0,1 ( $1,8 \cdot 10^{-3}$ )	0,0 ( $1,2 \cdot 10^{-2}$ )

For stofferne toluen, trichlorethen, tetrachlorethen og benzen og delvist MTBE er de beregnede BCF-værdier tæt på hinanden. BCF-værdierne er endvidere tæt på de værdier, som opnås ved ligevægt. De forskellige modeller forudsiger endvidere sammenlignelige koncentrationer i rodafgrøder.

For *n*-dodecan er billedet mindre klart. Gulerodsmodellen forudsiger en  $BCF_{\text{Standard}}$  der er væsentligt under BCF ved ligevægt, hvor kartoffelmodellen forudsiger en  $BCF_{\text{Standard}}$  tæt på ligevægt. For dette stof er kartoffelmodellen måske den mest realistiske, da den diffusive transport ind i rødderne betyder mere end transporten med transpirationsvandet. Konklusionen er derfor, at for MTBE, toluen, trichlorethen, tetrachlorethen, benzen og dodecan er antagelse om ligevægt mellem jorden og planterødderne rimelig.

Der opnås ikke ligevægt for benzo(a)pyren og naphthalen i kartoflerne. Dette betyder, at Briggs', Trapps og Chious korrelationer, der alle bygger på antagelsen om ligevægt, vil overestimere optaget i rodfrugter.

Det bør nævnes, at for naphthalen blev der tidligere påvist en generel tendens til, at koncentrationen i rødder blev overestimeret af modellerne, sandsynligvis

fordi der ikke er taget hensyn til omsætning i afgrøderne (og muligvis pga. analyseusikkerhed).

For en forurennet jord med almindeligt kulstofindhold (jord 1, tabel 7.2a) uden dæklag er kartoffel den mest kritiske afgrøde for samtlige stoffer undtagen benzo(a)pyren, hvor rodfrugter er den mest kritiske afgrøde. 1 år efter etablering af et dæklag er rodfrugter (andre end kartoffel) den mest kritiske afgrødetype for benzo(a)pyren, medens frugt er den mest kritiske type for de mest mobile stoffer (MTBE, toluen, trichlorethen, benzen, tetrachlorethen) samt naphthalen. Kartoffel er den mest kritiske afgrøde for n-dodecan. 10 år efter etablering af et dæklag er rodfrugter den mest kritiske afgrødetype for benzo(a)pyren, medens kartoffel er mest kritisk for MTBE og dodecan, og frugt er mest kritisk for de øvrige stoffer.

For en forurennet jord med meget lavt kulstofindhold (jord 2, tabel 7.2b) uden dæklag er kartoffel den mest kritiske afgrøde for samtlige stoffer undtagen benzo(a)pyren, hvor rodfrugter er den mest kritiske afgrøde. 1 år efter etablering af et dæklag er rodfrugter (andre end kartoffel) den mest kritiske afgrøde for benzo(a)pyren, medens frugt er den mest kritiske gruppe for de mest mobile stoffer (MTBE, toluen, trichlorethen, benzen, tetrachlorethen), og kartoffel er den mest kritiske for naphthalen og n-dodecan. 10 år efter etablering af et dæklag er rodfrugter den mest kritiske afgrødetype for benzo(a)pyren, medens kartoffel er mest kritisk for dodecan, og frugt er mest kritisk for de øvrige stoffer.

For de mest kritiske afgrøder er der foretaget beregning af den absolutte koncentration i afgrøden ved de jordkoncentrationer, som er angivet i tabel 7.1. Resultaterne af disse beregninger er samlet i tabel 7.3a og b (henholdsvis jord 1 og jord 2).

Tabel 7.3a

Koncentrationer i afgrøder (mg/kg frisk plante). Jord 1 er anvendt i beregningerne. Alle afgrøder er med skræl.

Stof	Dæklag	Koncentration (mg/kg frisk vægt)
Naphthalen	Uden dæklag	0,2 (kartoffel)
Benzo(a)pyren	Uden dæklag	$3,9 \cdot 10^{-3}$ (anden rodfrugt)
MTBE	Uden dæklag	34 (kartoffel)
Toluen	Uden dæklag	3,4 (kartoffel)
n-Dodecan	Uden dæklag	2,5 (kartoffel)
Trichlorethen	Uden dæklag	0,2 (kartoffel)
Benzen	Uden dæklag	$7,6 \cdot 10^{-2}$ (kartoffel)
Tetrachlorethen	Uden dæklag	1,1 (kartoffel)
Naphthalen	Dæklag 1 år	$7,5 \cdot 10^{-2}$ (frugt)
Benzo(a)pyren	Dæklag 1 år	$2,0 \cdot 10^{-3}$ (anden rodfrugt)
MTBE	Dæklag 1 år	11 (frugt)
Toluen	Dæklag 1 år	2,6 (frugt)
n-Dodecan	Dæklag 1 år	0,3 (kartoffel)
Trichlorethen	Dæklag 1 år	$7,8 \cdot 10^{-2}$ (frugt)
Benzen	Dæklag 1 år	$6,4 \cdot 10^{-2}$ (frugt)
Tetrachlorethen	Dæklag 1 år	0,7 (frugt)
Naphthalen	Dæklag 10 år	$7,5 \cdot 10^{-2}$ (frugt)
Benzo(a)pyren	Dæklag 10 år	$2,0 \cdot 10^{-3}$ (frugt)
MTBE	Dæklag 10 år	8,3 (frugt)
Toluen	Dæklag 10 år	1,8 (frugt)
n-Dodecan	Dæklag 10 år	0,1 (kartoffel)
Trichlorethen	Dæklag 10 år	$6,0 \cdot 10^{-2}$ (frugt)
Benzen	Dæklag 10 år	$2,4 \cdot 10^{-2}$ (frugt)
Tetrachlorethen	Dæklag 10 år	0,3 (frugt)

Tabel 7.3b

Koncentrationer i afgrøder (mg/kg frisk plante). Jord 2 er anvendt i beregningerne. Alle afgrøder er med skræl.

Stof	Dæklag	Koncentration (mg/kg frisk vægt)
Naphthalen	Uden dæklag	3,8 (kartoffel)
Benzo(a)pyren	Uden dæklag	$8,0 \cdot 10^{-2}$ (anden rodfrugt)
MTBE	Uden dæklag	145 (kartoffel)
Toluen	Uden dæklag	45 (kartoffel)
n-Dodecan	Uden dæklag	27 (kartoffel)
Trichlorethen	Uden dæklag	0,2 (kartoffel)
Benzen	Uden dæklag	0,6 (kartoffel)
Tetrachlorethen	Uden dæklag	13 (kartoffel)
Naphthalen	Dæklag 1 år	0,5 (kartoffel)
Benzo(a)pyren	Dæklag 1 år	$4,0 \cdot 10^{-2}$ (anden rodfrugt)
MTBE	Dæklag 1 år	13 (frugt)
Toluen	Dæklag 1 år	2,0 (frugt)
n-Dodecan	Dæklag 1 år	$3,9 \cdot 10^{-2}$ (kartoffel)
Trichlorethen	Dæklag 1 år	$8,0 \cdot 10^{-2}$ (frugt)
Benzen	Dæklag 1 år	$1,3 \cdot 10^{-2}$ (frugt)
Tetrachlorethen	Dæklag 1 år	0,2 (frugt)
Naphthalen	Dæklag 10 år	1,2 (frugt)
Benzo(a)pyren	Dæklag 10 år	$4,0 \cdot 10^{-2}$ (anden rodfrugt)
MTBE	Dæklag 10 år	0,7 (frugt)
Toluen	Dæklag 10 år	$7,4 \cdot 10^{-2}$ (frugt)
n-Dodecan	Dæklag 10 år	$1,3 \cdot 10^{-3}$ (kartoffel)
Trichlorethen	Dæklag 10 år	$3,1 \cdot 10^{-3}$ (frugt)
Benzen	Dæklag 10 år	$4,4 \cdot 10^{-4}$ (frugt)
Tetrachlorethen	Dæklag 10 år	$6,8 \cdot 10^{-3}$ (frugt)

En af grundene, til at frugt er en relativt mere kritisk afgrøde end jordfrugterne, når der etableres et dæklag, er, at frugttræers rødder er antaget at nå det forurenede lag, hvor f.eks. kartofflen er antaget at ligge i de øverste 0,5 m.

Det bør endelig fremhæves, at beregningerne på et par punkter ikke er baseret på et realistisk "værst tænkelige" grundlag, men på et urealistisk "mere end værst tænkelige" grundlag, idet omsætning/nedbrydning af stofferne i planterne er sat til 0 i beregningerne, samt at der i frugttræsmodellen er set bort fra fordampning af stofferne fra træet og frugten. Det betyder, at koncentrationerne i afgrøderne snarere overvurderes end undervurderes.

### 7.2.3 Ældningens betydning

Især for de hydrofobe stoffer vil biotilgængeligheden sandsynligvis være ca. 50% lavere for forurenede jorde end for spiket jord, hvorfor BCF og dermed det daglige indtag forventes at være ca. en faktor 2 lavere i forurenede jorde end i nyspikede jorde. Da der i ovenstående beregninger ikke er taget hensyn til ældningens betydning for tilgængeligheden, er dette endnu en grund til, at koncentrationerne i afgrøderne overvurderes.



### 7.3 Følsomhedsanalyse

Ved anvendelse af modellerne er det relevant at vide hvilke parametre, det er vigtigst at anvende en præcist bestemt værdi for. Derfor er betydningen af variation i de enkelte parametre analyseret for de tre vigtigste modeller.

For seks af de otte stoffer og for afgrøderne kartofler og frugt, der generelt er de mest kritiske afgrøder, blev der gennemført en følsomhedsanalyse til vurdering af betydningen af de indgående parametre for beregningsresultaterne. Følsomhedsanalysen er kun gennemført for jord 1, som er den mest udbredte af de to jordtyper.

Følsomhedsanalysen bestod af følgende trin:

- identifikation af parametre, der indgår i modellen
- vurdering/beregning af usikkerheden på/variationen i parameteren
- Monte-Carlo simuleringer, hvor parametrene varieres enkeltvis
- Monte-Carlo simulering, hvor alle parametre varieres tilfældigt og uafhængigt af hinanden.

#### 7.3.1 Identifikation af parametre

Modelparametrene kan deles op i tre grupper:

1. stofparametre
2. jordparametre
3. planteparametre

##### 7.3.1.1 Stofparametre

Tabel 7.4 viser de to stofparametre, som i øvrigt indgår i alle modeller, samt den vurderede usikkerhed på bestemmelsen af parametrene.

Tabel 7.4  
Usikkerhed på stofparametre

Stof	Log $K_{ow}$	Std.afv.	$K_{AW}$	Std.afv. (skønnet til 15%)
Naphthalen	3,36	0,5	$1,7 \cdot 10^{-2}$	$2,5 \cdot 10^{-3}$
Benzo(a)pyren	6,13	0,2	$1,4 \cdot 10^{-5}$	$2,1 \cdot 10^{-6}$
MTBE	1,14	0,1	$1,8 \cdot 10^{-2}$	$2,6 \cdot 10^{-3}$
Toluen	2,75	0,1	$2,2 \cdot 10^{-1}$	$3,3 \cdot 10^{-2}$
n-Dodecan	5,8	0,2	$3,1 \cdot 10^2$	$4,6 \cdot 10^1$
Trichlorethen	3,03	0,1	$3,4 \cdot 10^{-1}$	$5,1 \cdot 10^{-2}$

##### 7.3.1.2 Jordparametre

Tabel 7.5 viser de anvendte jordparametre, som i øvrigt går igen i alle modeller, samt det anvendte variationsområde for disse parametre.

Der indgår endvidere en korrelation til beregning af  $K_D$  ud fra log  $K_{ow}$  (ligning 3). Standardafvigelsen på estimatet af  $K_{oc}$  ( $\pm 2\sigma = 95\%$ ) er 0,45 log-enheder (EC 1996). Denne usikkerhed indgår i bestemmelsen af usikkerheden på  $K_D$ .

Tabel 7.5  
Jordparametre og anvendt variation for disse parametre

Jorde	$f_{oc}$	Std.afv. Sat til 10%	$V_v$	Std.afv.	$V_L$	Std.afv.	$d'$	Std.afv.
	%	%					kg/L	kg/L
Jord 1	2	0,2	0,35	0,1	0,1	0,1	1,6	0,15

### 7.3.1.3 Planteparametre

Tabel 7.6 viser de anvendte planteparametre samt det anvendte variationsområde for disse parametre. Kun de parametre, der indgår i beregning af koncentrationen i rodafgrøder samt frugt indgår, da de øvrige planter viste sig at være af mindre betydning for den samlede indtagelse af miljøfremmede, organiske stoffer.

Tabel 7.6  
Planteparametre og anvendt variation på parametrene

Parameter	Anvendt model		
	Kartoffelmodel, gulerodsmodel	Kartoffel- model	Frugttræs- model
	Gulerod	Kartoffel	Æble
Lipidindhold i roden (kg/kg)	0,004	0,003	-
Std.afv.	0,001	0,001	-
Vandindhold i roden (kg/kg)	0,89	0,8	-
Std.afv.	0,05	0,05	-
Luftvolumen i roden(m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> )	0,102	0,061	-
Std.afv.	0,02	0,02	-
Kulhydrat (kg/kg)	0,088	0,172	-
Std.afv.	0,005	0,005	-
Roddiameter (m)	0,034	0,05	-
Std.afv.	0,004	0,02	-
Transpirationshastighed L/kg blad/d.	5	-	0,082
Std.afv.	1	-	0,01
Bladvækstrate	0,035	-	$2,74 \cdot 10^{-5}$
Std.afv.	0,005	-	$1,00 \cdot 10^{-5}$
Frugt-vandindhold	-	-	0,851
Std.afv.	-	-	0,005
Roddybde (m)	1	-	2
Std.afv.	0,5	-	1
Rodfrugtdybde (m)	0,15	0,3	-
Std.afv.	0,05	0,1	-
Vækstperiode (dage)	60	90	-
Std.afv.	10	15	-

Der indgår endvidere, som tidligere beskrevet, forskellige korrelationer til beregning af plante-vand fordelingskoefficienten og TSCF. Disse er ligeledes behæftet med en usikkerhed (se tabel 7.7), som er indarbejdet i beregningen af den samlede usikkerhed på de beregnede BCF-værdier.

Tabel 7.7  
Usikkerhed på beregning af plante-vand fordelingskoefficienter og TSCF

Korrelation	Usikkerhed
$\log(K_{RW})$	0,6 (std.afv.)
$\log(\text{TSCF})$	0,25 (std.afv.)
$\log(K_{Wood})$	$\log K_{Wood} = -0,27(\pm 0,25) + 0,632(\pm 0,063) \cdot \log K_{ow}$

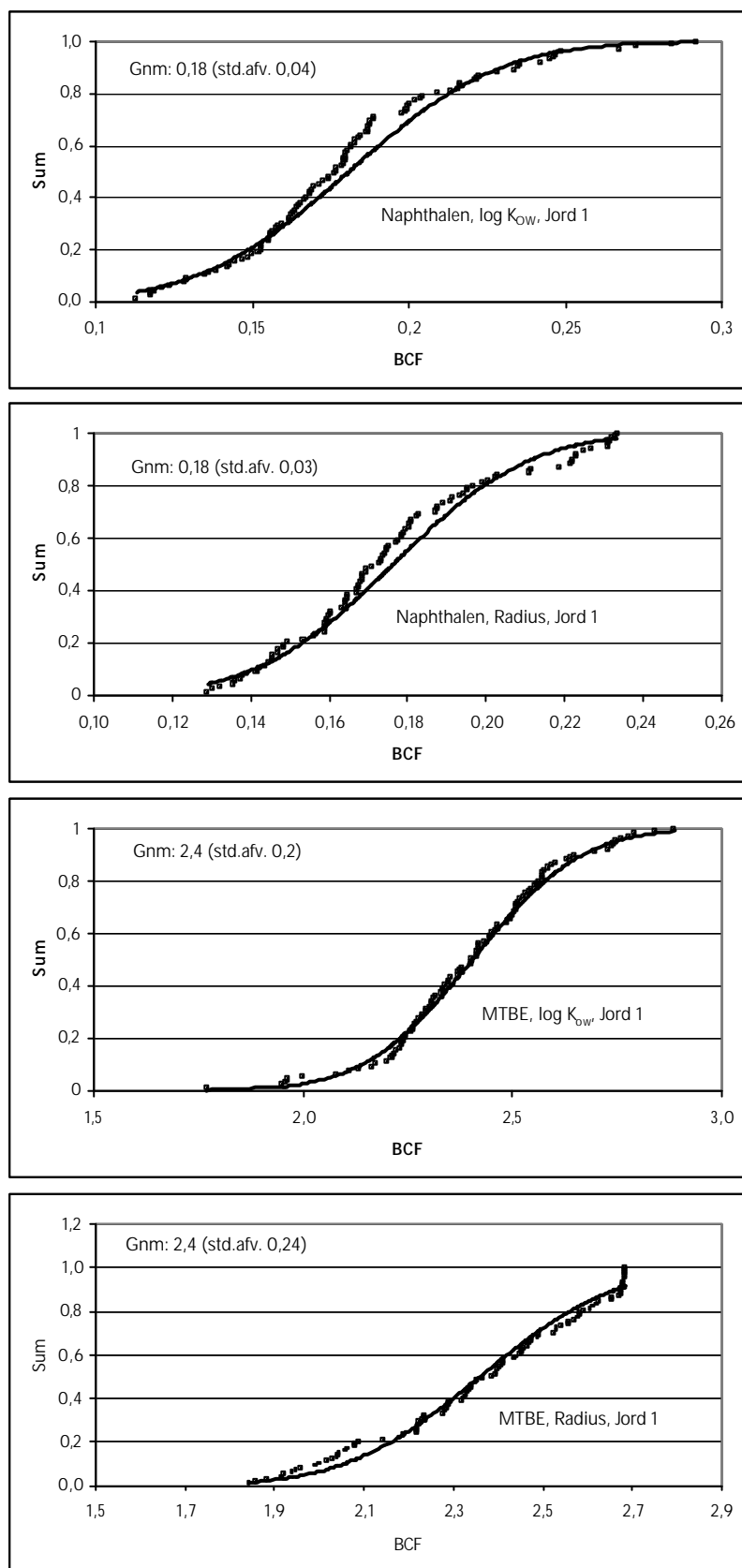
### 7.3.2 Monte-Carlo simuleringer

Til analyse af de enkelte parametres betydning er følgende beregninger foretaget:

- Monte-Carlo simuleringer, hvor der for hver enkelt parameter i modellen indsættes 100 tilfældige tal fra en normalfordeling med et gennemsnit svarende til værdien af den analyserede parameter og standardafvigelse, som angivet i tabellerne 7.4-7.6.
- Monte-Carlo simulering, hvor alle parametre varieres tilfældigt og uafhængigt af hinanden. Heri er usikkerheden på de anvendte korrelationer til beregning af  $K_{OC}$ , TSCF og  $K_{RW}$  indgået (tabel 7.4-7.7).

#### 7.3.2.1 Variation af enkeltparametre

Figur 7.2 viser eksempler på, hvorledes de beregnede BCF-værdier varierer med variationer af forskellige parametre. I de illustrerede eksempler følger de beregnede BCF-værdier tilnærmelsesvis en normalfordeling. Grunden til, at beregningerne ikke helt følger en normalfordeling, er bl.a., at Monte-Carlo simuleringer med kun 100 udtrukne tilfældige tal er i underkanten.



Figur 7.2

Eksempler på variationen af estimerede BCF-værdier for kartoffel dyrket i jord 1 uden dæklag, når én parameter varieres ad gangen. Hvert punkt repræsenterer resultatet fra én beregning. Kurven er det bedste fit, hvor der er antaget en normalfordeling af de beregnede BCF-værdier.

Tabel 7.8 (a+b) viser en oversigt over, hvorledes den beregnede BCF-værdi varierer med variationen på de enkelte parametre for kartoffel (tabel 7.8a) og frugt (tabel 7.8b). I de to tabeller er den parameter, der resulterer i den største standardafvigelse på den beregnede BCF-værdi, markeret med en ramme.

Tabel 7.8a  
Usikkerhedsanalyse af beregningen af BCF for kartoffel. Beregninger udført for jord 1 uden dæklag

	Naphthalen	Benzo(a)pyren	MTBE	Toluen	n-Dodecan	Trichlorethen
logK <sub>ow</sub>	Gnm.:1,8·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 3,8·10 <sup>-2</sup> )	Gnm.:2,3·10 <sup>-3</sup> (std.afv. 9,1·10 <sup>-4</sup> )	Gnm.:2,4 (std.afv. 2,1·10 <sup>-1</sup> )	Gnm.:4,1·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 4,9·10 <sup>-2</sup> )	Gnm.:1,0·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 2,1·10 <sup>-3</sup> )	Gnm.:3,2·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 2,8·10 <sup>-2</sup> )
K <sub>AW</sub>	Gnm.:1,7·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 5,0·10 <sup>-3</sup> )	Gnm.:2,2·10 <sup>-3</sup> (std.afv. 3,5·10 <sup>-6</sup> )	Gnm.:2,4 (std.afv. 6,6·10 <sup>-2</sup> )	Gnm.:4,0·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 1,6·10 <sup>-4</sup> )	Gnm.:1,0·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 1,1·10 <sup>-4</sup> )	Gnm.:3,2·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 1,1·10 <sup>-4</sup> )
Luftfraktion i afgrøden	Gnm.:1,7·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 1,1·10 <sup>-2</sup> )	Gnm.:2,2·10 <sup>-3</sup> (std.afv. 6,7·10 <sup>-6</sup> )	Gnm.:2,4 (std.afv. 1,2·10 <sup>-1</sup> )	Gnm.:4,0·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 6,5·10 <sup>-5</sup> )	Gnm.:1,0·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 0,0)	Gnm.:3,2·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 3,4·10 <sup>-5</sup> )
Vækstperiode	Gnm.:1,9·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 7,0·10 <sup>-3</sup> )	Gnm.:3,2·10 <sup>-3</sup> (std.afv. 4,9·10 <sup>-4</sup> )	Gnm.:2,5 (std.afv. 5,4·10 <sup>-2</sup> )	Gnm.:4,0·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 2,1·10 <sup>-7</sup> )	Gnm.:1,0·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 0,0)	Gnm.:3,2·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 7,8·10 <sup>-8</sup> )
Vandindhold i afgrøden	Gnm.:1,7·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 2,5·10 <sup>-3</sup> )	Gnm.:2,2·10 <sup>-3</sup> (std.afv. 1,5·10 <sup>-4</sup> )	Gnm.:2,4 (std.afv. 1,1·10 <sup>-1</sup> )	Gnm.:4,0·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 1,4·10 <sup>-2</sup> )	Gnm.:1,0·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 5,0·10 <sup>-5</sup> )	Gnm.:3,2·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 8,6·10 <sup>-3</sup> )
Radius	Gnm.:1,8·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 2,7·10 <sup>-2</sup> )	Gnm.:2,8·10 <sup>-3</sup> (std.afv. 2,4·10 <sup>-3</sup> )	Gnm.:2,4 (std.afv. 2,4·10 <sup>-1</sup> )	Gnm.:4,0·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 6,5·10 <sup>-4</sup> )	Gnm.:1,0·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 2,3·10 <sup>-7</sup> )	Gnm.:3,2·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 3,9·10 <sup>-4</sup> )
Lipidindhold i afgrøden	Gnm.:1,8·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 2,7·10 <sup>-2</sup> )	Gnm.:2,1·10 <sup>-3</sup> (std.afv. 9,5·10 <sup>-5</sup> )	Gnm.:2,4 (std.afv. 2,2·10 <sup>-2</sup> )	Gnm.:4,1·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 4,5·10 <sup>-2</sup> )	Gnm.:1,1·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 3,6·10 <sup>-2</sup> )	Gnm.:3,3·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 4,5·10 <sup>-2</sup> )
Jorddata	Gnm.:1,7·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 9,8·10 <sup>-3</sup> )	Gnm.:2,2·10 <sup>-3</sup> (std.afv. 1,4·10 <sup>-4</sup> )	Gnm.:2,4 (std.afv. 2,8·10 <sup>-1</sup> )	Gnm.:4,0·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 1,8·10 <sup>-2</sup> )	Gnm.:1,0·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 6,8·10 <sup>-3</sup> )	Gnm.:3,2·10 <sup>-1</sup> (std.afv. 1,7·10 <sup>-2</sup> )

Det fremgår af tabel 7.8a, at følsomheden af de beregnede BCF-værdier for kartoffel er afhængig af stoffet.

- For de stoffer, der kun diffunderer meget langsomt ind i kartofflen (højt K<sub>ow</sub>/K<sub>AW</sub> forhold som f.eks. naphthalen og benzo(a)pyren), har parametrene radius og vækstperiode relativt stor betydning, medens de har mindre betydning for de stoffer, der hurtigt diffunderer ind i kartofflen.
- Lipidindholdet i afgrøden har stor betydning for de beregnede BCF-værdier for alle stoffer, og det er den mest følsomme parameter for n-dodecan og trichlorethen.
- Den anvendte log K<sub>ow</sub>-værdi har ligeledes betydelig indflydelse på de beregnede BCF-værdier, og det er den mest følsomme parameter for naphthalen og toluen. Log K<sub>ow</sub> har indflydelse på den beregnede biotilgængelighed, hvor biotilgængeligheden falder med voksende log K<sub>ow</sub> samt på rod-vand fordelingskoefficienten, som vokser med voksende log K<sub>ow</sub>.
- Jorddata er i denne analyse puljet, så f<sub>oc</sub>, densitet, vand- og luftindhold i jorden er varieret tilfældigt samtidig. Det fremgår af tabel 7.8a, at jorddata har en vis indflydelse på de beregnede BCF-værdier, og at de er den vigtigste parameter for MTBE.

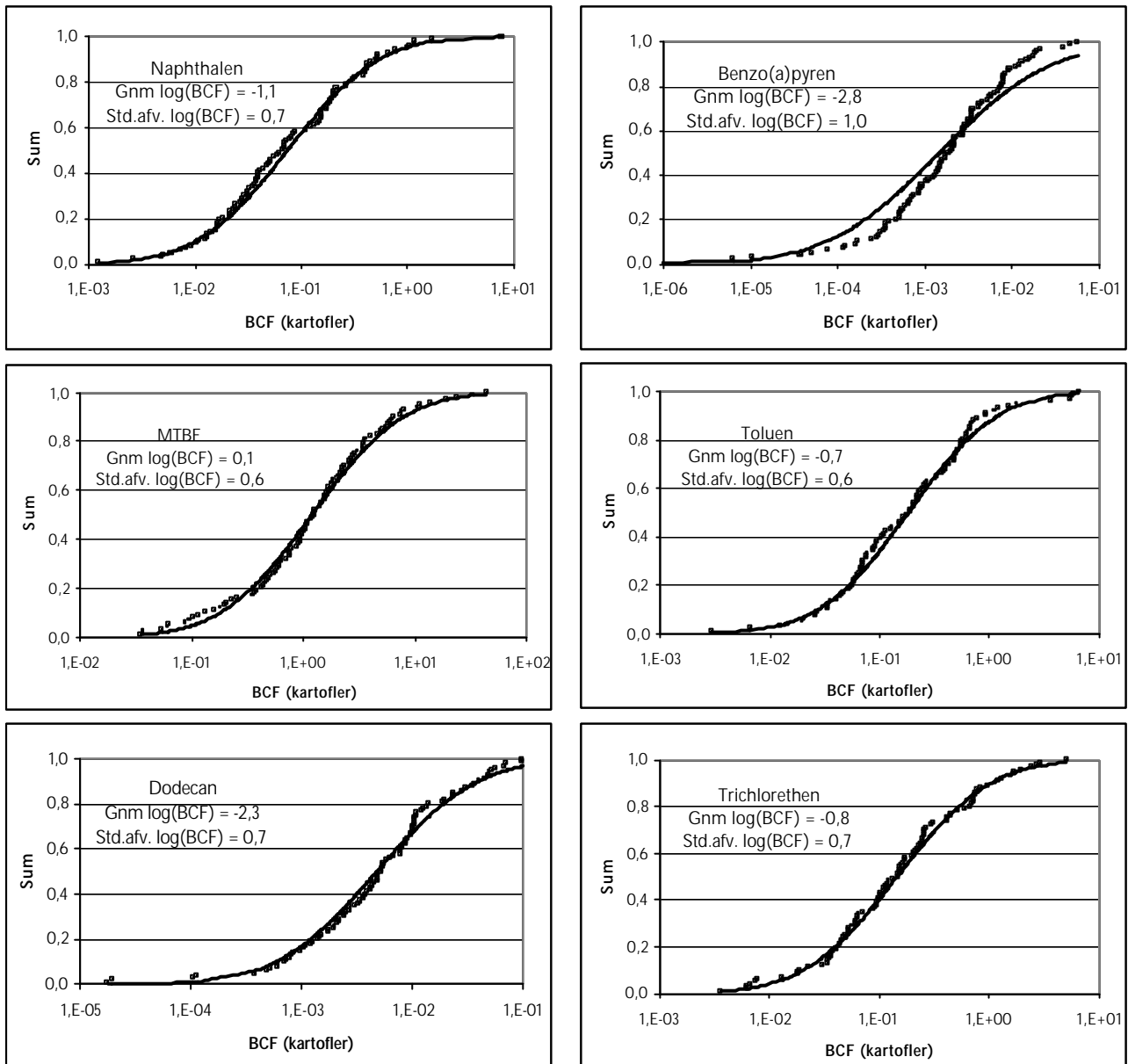
Tabel 7.8b  
Usikkerhedsanalyse af beregning af BCF (baseret på våd jord) for  
frugt. Beregninger udført for jord 1 uden dæklag

Parameter	Naphthalen	Benzo(a)pyren	MTBE	Toluen	n-Dodecan	Trichlorethen
Log $K_{ow}$	Gnm.: 0,16 (std.afv. 0,082)	Gnm.: $4,8 \cdot 10^{-6}$ (std.afv. $4,9 \cdot 10^{-6}$ )	Gnm.: 2,96 (std.afv. 0,051)	Gnm.: 0,58 (std.afv. 0,121)	Gnm.: $2,5 \cdot 10^{-5}$ (std.afv. $2,9 \cdot 10^{-5}$ )	Gnm.: 0,32 (std.afv. 0,071)
Transpirationflow	Gnm.: 0,14 (std.afv. 0,000)	Gnm.: $2,9 \cdot 10^{-6}$ (std.afv. $1,7 \cdot 10^{-7}$ )	Gnm.: 2,98 (std.afv. 0,000)	Gnm.: 0,57 (std.afv. 0,001)	Gnm.: $1,6 \cdot 10^{-5}$ (std.afv. $7,7 \cdot 10^{-7}$ )	Gnm.: 0,31 (std.afv. 0,000)
Vækstrate	Gnm.: 0,14 (std.afv. 0,001)	Gnm.: $3,1 \cdot 10^{-6}$ (std.afv. $8,1 \cdot 10^{-7}$ )	Gnm.: 2,98 (std.afv. 0,001)	Gnm.: 0,57 (std.afv. 0,002)	Gnm.: $1,7 \cdot 10^{-5}$ (std.afv. $3,3 \cdot 10^{-6}$ )	Gnm.: 0,31 (std.afv. 0,002)
Tørstofindhol i frugt	Gnm.: 0,15 (std.afv. 0,005)	Gnm.: $3,1 \cdot 10^{-6}$ (std.afv. $1,0 \cdot 10^{-7}$ )	Gnm.: 3,11 (std.afv. 0,106)	Gnm.: 0,59 (std.afv. 0,020)	Gnm.: $1,7 \cdot 10^{-5}$ (std.afv. $5,9 \cdot 10^{-7}$ )	Gnm.: 0,33 (std.afv. 0,011)
Jorddata	Gnm.: 0,14 (std.afv. 0,008)	Gnm.: $2,9 \cdot 10^{-6}$ (std.afv. $1,8 \cdot 10^{-7}$ )	Gnm.: 3,04 (std.afv. 0,348)	Gnm.: 0,57 (std.afv. 0,026)	Gnm.: $1,7 \cdot 10^{-5}$ (std.afv. $1,1 \cdot 10^{-6}$ )	Gnm.: 0,31 (std.afv. 0,016)

Tabel 7.8b viser, at frugttræsmodellen er mest følsom for ændringer i  $\log K_{ow}$  for alle undersøgte stoffer undtagen det mindst sorberende stof, MTBE. For MTBE er modellen meget robust for variation af alle parametre, og karakteriseringen af jorden er den parameter, der er mest betydningsfuld. De anvendte karakteristika for planten (transpirationshastighed, hastighedskonstanten for vækst og tørstofindhold i frugten) har kun mindre betydning for den beregnede BCF-værdi.

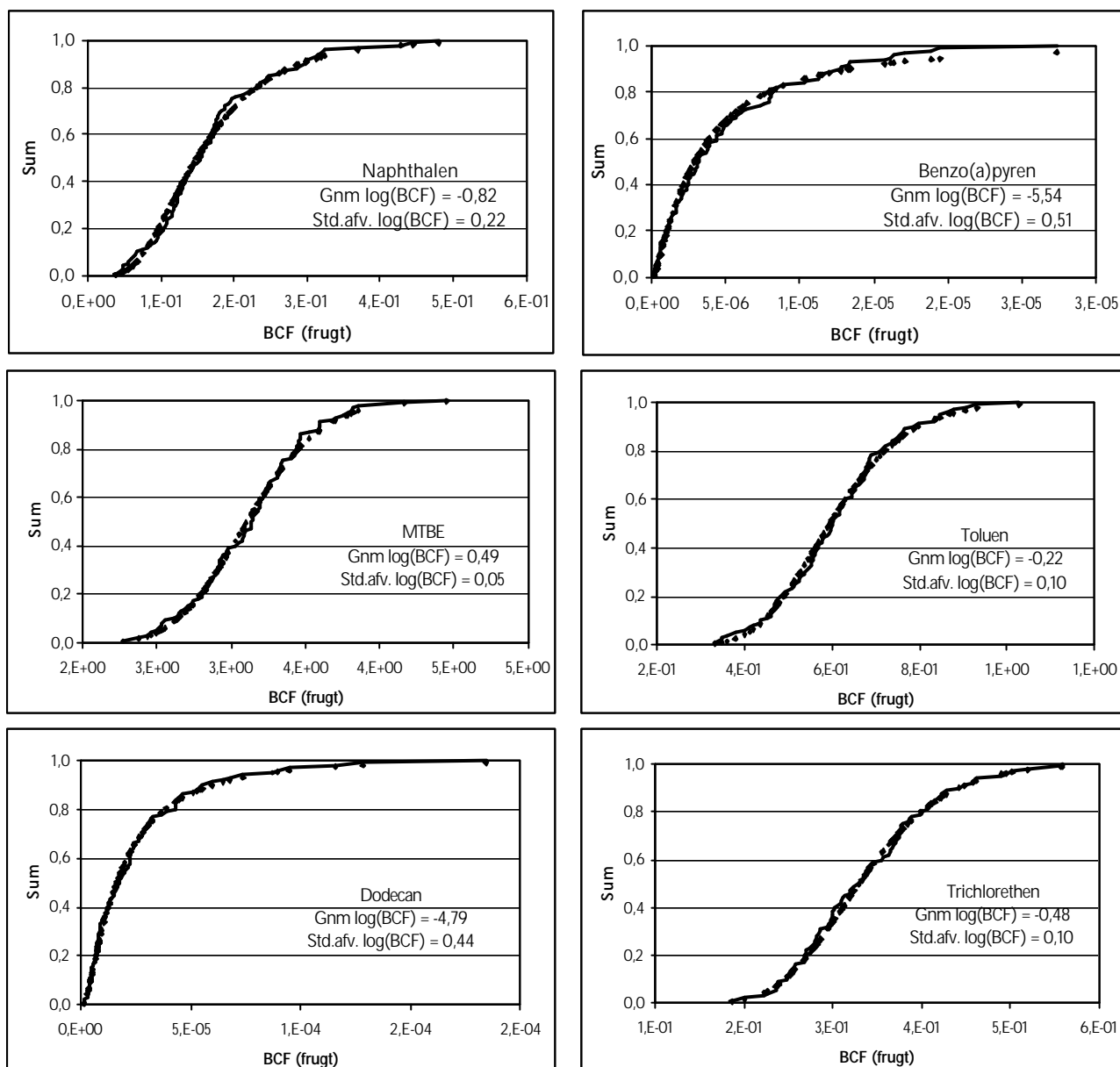
#### 7.3.2.2 Variation af alle parametre

Figur 7.2a og b viser variationsområdet for de beregnede BCF-værdier for henholdsvis kartoffel og frugt ved samtidig variation af samtlige parametre og korrelationer. Ved samtidig variation af samtlige parametre og korrelationer følger variationen af de beregnede BCF-værdier tilnærmelsesvis en logaritmisk normalfordeling.



Figur 7.2a

Variation på beregnede BCF-værdier for kartoffel, når alle parametre varierer på én gang. Hvert punkt repræsenterer resultatet fra én beregning. Kurven er det bedste fit, hvor der er antaget en logaritmisk normal fordeling af de beregnede BCF-værdier.



Figur 7.2b

Variation af beregnede BCF-værdier for frugt, når alle parametre varierer på én gang. Hvert punkt repræsenterer resultatet fra én beregning, og kurven er det bedste fit, hvor der er antaget en logaritmisk normal fordeling af de beregnede BCF-værdier.

Tabel 7.9a og b viser gennemsnit og standardafvigelse af de beregnede BCF-værdier for henholdsvis kartoffel og frugt.



Tabel 7.9a  
Variation i beregnede log(BCF)-værdier for kartoffel. Tallene i parentes angiver den tilsvarende antilogaritmerede værdi

	Naphthalen	Benzo(a)pyren	MTBE	Toluen	n-Dodecan	Trichlorethen
Gnm log(BCF)	-1,1 (0,1)	-2,8 (1,6·10 <sup>-3</sup> )	0,1 (1,3)	-0,7 (2,0·10 <sup>-1</sup> )	-2,3 (5,0·10 <sup>-3</sup> )	-0,8 (1,6·10 <sup>-1</sup> )
Std.afv. log(BCF)	0,7 (5,0)	1,0 (10,0)	0,6 (4,0)	0,6 (4,0)	0,7 (5,0)	0,7 (5,0)

Det fremgår af tabel 7.9a, at standardafvigelsen (bortset fra for benzo(a)pyren) for de beregnede BCF-værdier for kartoffel er meget nær hinanden, ca. 0,7 log-enheder. Dvs. variationen i de beregnede BCF-værdier er under en størrelsesorden, For benzo(a)pyren er variationen i de beregnede BCF-værdier ca. en størrelsesorden svarende til en faktor 10. Det vil sige, at det har begrænset betydning, hvis en eller flere af de parametre, der anvendes i modellen, ikke er præcist bestemt.

Tabel 7.9b  
Variation i beregnede BCF-værdier for frugt. Tallene i parentes angiver den tilsvarende antilogaritmerede værdi

	Naphthalen	Benzo(a)pyren	MTBE	Toluen	n-Dodecan	Trichlorethen
Gnm log(BCF)	-0,8 (0,1)	-5,5 (2,9·10 <sup>-6</sup> )	0,5 (3,1)	-0,2 (5,9·10 <sup>-1</sup> )	-4,8 (1,6·10 <sup>-5</sup> )	-0,5 (3,3·10 <sup>-1</sup> )
Std.afv. log(BCF)	0,2 (1,7)	0,5 (3,2)	0,1 (1,1)	0,1 (1,3)	0,5 (2,8)	0,1 (1,3)

Det fremgår af tabel 7.9b, at standardafvigelsen for de beregnede BCF-værdier for frugt (æble) ligger under ca. 0,5 log-enheder, dvs. variationen i de beregnede BCF-værdier er væsentligt under en størrelsesorden, dvs. en faktor 10. De største standardvariationer opnås for de hydrofobe stoffer, som kun optages i begrænset omfang i frugter, nemlig benzo(a)pyren og dodecan. For de øvrige stoffer er standardafvigelsen væsentligt under 0,5 log-enheder. Det vil sige, at det har begrænset betydning, hvis en eller flere af de parametre, der anvendes i modellen, ikke er præcist bestemt.

#### 7.4 Sammenfatning

Der er udført beregninger af optagelse af otte udvalgte modelstoffer i forskellige rodfrugter, bladafgrøder og frugter. Den daglige indtagelse af de forskellige afgrøder er koblet med det beregnede planteoptag, hvorved en forventet daglig indtagelse af de forskellige kemikalier med afgrøder, er beregnet.

Når der ikke lægges et rent lag jord over den forurenede jord, er kartoffel generelt den afgrøde, der bidrager mest til det potentielle daglige humane indtag af miljøfremmede, organiske stoffer via afgrøder. Når der lægges et rent lag jord over den forurenede jord, er andre rodfrugter eller kartofler den mest kritiske afgrøde for de mest hydrofobe stoffer, medens frugt er den mest kritiske afgrøde for de øvrige, mere mobile modelstoffer.

Der er udført en følsomhedsanalyse af modellerne, og som viste, at hvis alle indgående parametre varieres samtidig, er standardafvigelsen på de beregnede BCF-værdier for både kartoffel og frugt under en størrelsesorden.

For de meget lidt mobile stoffer, hvor der ikke kan antages ligevægt mellem rodfrugten og jorden, er karakterisering af kartofflen med hensyn til størrelse og delvis luftvolumen samt dyrkningsperiode væsentlige parametre, medens disse parametre betyder mindre for de øvrige stoffer.

Følsomhedsanalysen viste endvidere, at lipidindholdet i rodfrugter og stoffernes  $\log K_{ow}$  har betydning for optagelsen i rodfrugterne, medens luft-vand fordelingskoefficienten kun har mindre betydning for denne optagelse.

$\log K_{ow}$  er for alle undersøgte stoffer undtagen MTBE den mest følsomme parameter ved beregningen af frugtoptaget. For MTBE er karakteriseringen af jorden den mest betydningsfulde parameter. De anvendte karakteristika for planten har kun mindre betydning for den beregnede BCF-værdi.

# 8 Praktisk brug af modellen i forbindelse med afværgeforanstaltninger

## 8.1 Udviklet modelværktøj

Som en af konklusionerne på projektet foreslås de i tabel 8.1 nævnte planteoptagsmodeller til risikoscreening vedrørende human eksponering via afgrøder dyrket på forurenede jord.

Bemærk, at modellerne kun gælder for ikke-ioniserbare og ikke-polære stoffer.

Tabel 8.1  
Modeller til forskellige formål

Stof	Afgrøde	Andre forhold	Valg af planteoptagsmodel
$\log(K_{OW}/K_{AW}) < 4$	Rødder og stængelknolde		Der kan antages ligevægt. Anvend Briggs ligning, TGD-rod (ligning 17) eller Chious model (ligning 51)
$\log(K_{OW}/K_{AW}) > 4$	Rødder (gulerod o.l.)		Udfør beregninger både med kartoffel- og gulerodsmodellen. Benyt det beregningsresultat, der giver den højeste BCF
$\log(K_{OW}/K_{AW}) > 4$	Stængelknolde (kartoffel)		Udfør beregninger med kartoffelmodellen
$\log K_{OW} > 3$	Bladafgrøder	Uden rent jordække	Anvend Travis & Arms-modellen
$\log K_{OW} < 3$	Bladafgrøder	Uden rent jordække	Anvend den udbyggede TGD-blad model, hvor der også tages hensyn til jordstænk
Alle stoffer	Bladafgrøder	Med rent jordække	Anvend den udbyggede TGD-blad model, hvor der også tages hensyn til jordstænk
Alle stoffer	Frufter og bær		Anvend frugttræsmodellen.

Selv om der lægges et lag ren jord over den forurenede jord, kan der ske en overførelse af stoffer til planterne. Til beregning af transporten af stoffer op gennem jordsøjlen og af fordampningshastigheden fra jorden foreslås Jury-modellen anvendt. Fordampningshastigheden anvendes bl.a. til beregning af stofkoncentrationen i luft, som indgår i TGD-blad.

Modellerne er meget enkle og kræver ikke megen regnekraft. Bortset fra kartoffelmodellen og Jury-modellen kan beregningerne foretages med lommeregner og lidt god tid.

Modellerne er indbygget i én Excel-fil. I samme Excel-fil er der indlagt procedurer til beregning af koncentrationen i de tre faser i jorden (luft, vand og fast matrice) ud fra en kendt koncentration enten i jorden, i porevandet eller poreluften. Beregningerne kan nemt udføres "baglæns", dvs. jordens

koncentration kan f.eks. beregnes ud fra en kendt koncentration i jordens porevand eller i planten ved anvendelse af Excels "Goal Seek" funktion.

Excel-filen kan rekvireres hos Miljøstyrelsens Jordforureningskontor.

Modellerne kræver forholdsvis få stofdata: molvægt,  $\log K_{ow}$  og Henrys lovkonstant (alternativt vandopløselighed og damptryk). Disse data er generelt nemme at finde for de fleste stoffer, alternativt kan de beregnes med QSAR-modeller. Derudover er der mulighed for at specificere omsætnings hastigheden i planterne, hvor modellerne som udgangspunkt antager, at der ikke sker en omsætning i planterne. Der er indbygget en mindre database i Excel-filen, hvor disse typer data er indlagt for en række stoffer, deriblandt de udvalgte modelstoffer. Det er nemt for brugeren at udvide "databasen" med flere stoffer.

Til beregning af stoffets fordeling i jordmatricen kræves i princippet kun kendskab til jordens densitet og indhold af organisk kulstof samt volumenfraktioner af luft og vand. Der er ligeledes i regnearket indlagt en mindre jorddatabase, hvor forskellige jorde er karakteriseret. Disse er identiske med jordtyperne i Miljøstyrelsens Jagg-model (Miljøstyrelsen 1998). Også denne database kan nemt udvides med flere jorde.

Til beregning af optagelse i planter kræves en række plantespecifikke parametre:

- Gulerodsmodellen kræver data for vand- og lipidindhold i roden, og eventuelt kulhydratindhold og luftvolumen i rodfrugten. Data for disse kan findes på Fødevaredirektoratets hjemmeside under "Den lille levnedsmiddeltabel" på adressen [www.fdir.dk/publikationer/publikationer/publikationer/levntabel](http://www.fdir.dk/publikationer/publikationer/publikationer/levntabel). Derudover kræver modellen transpirationshastigheden (f.eks. udtrykt i L/kg rod/dag eller L/L rod/dag). Hvis man ikke har data for transpirationshastigheden, kan en standardværdi på 1 L/kg rod/dag anvendes.
- Kartoffelmodellen kræver data for lipid-, vand- og eventuelt kulhydratindhold i stængelknolden, samt diameter på stængelknolden. Derudover kræver modellen kendskab til luftvolumen i knolden, idet det har stor betydning for den hastighed, som stofferne optages med. Ved beregninger, hvor der simuleres et dæklag med ren jord, kræves endvidere kendskab til rodtybden og kendskab til, i hvilken dybde rodfrugten ligger.
- Travis & Arms kræver ingen plantespecifikke data.
- Ligevægtskorrelationerne (Trapp, Chiou, Briggs) kræver vand- og lipidindhold i roden, og eventuelt kulhydratindhold og luftvolumen i rodfrugten. Disse kan hentes på Fødevaredirektoratets hjemmeside.
- TGD-blad kræver de samme data som gulerodsmodellen og derudover bladareal, lipid- og vandindhold i bladene, samt en første ordens vækstrate for bladene. Endelig skal plantehøjden kendes.
- Frugttræsmodellen kræver transpirationshastigheden (f.eks. i L/kg/dag) samt en første ordens vækstrate for træet. Derudover skal frugtens

tørstofindhold være kendt (kan også findes på Fødevarerdirektoratets hjemmeside).

Der er indbygget en mindre database i Excel-filen, hvor disse plantespecifikke data er indlagt for en række afgrøder, deriblandt modelafgrøderne. Det er nemt for brugeren at udvide "databasen" med flere afgrødetyper.

## 8.2 Eksempler på anvendelse af modellerne

Modellerne er meget enkle og hurtige at anvende, og derfor kan de med en minimal arbejdsindsats anvendes til forudsigelse af koncentrationerne i afgrøder ud fra kendte koncentrationer i jorden eller i jordens porevand eller -luft.

Følgende spørgsmål kan f.eks. - besnærende nemt - besvares ved anvendelse af modellerne:

- Hvilke koncentrationer vil forekomme i typiske danske afgrøder, som dyrkes på en forurenede grund både med og uden dæklag?  
Dette kan bruges til en vurdering af, om det humane indtag vil kunne nå kritiske værdier samt af, hvor meget et dæklag reducerer planteoptaget og dermed det humane indtag. Man kan således også bestemme dæklagets tykkelse for at nå ned på acceptable koncentrationer i afgrøden
- Vil de jordkoncentrationer, der svarer til afdampningskriterierne i luften umiddelbart over terræn eller jordkvalitetskriterierne, give anledning til kritiske koncentrationer i afgrøden?
- Hvilke(n) afgrødetype(r) er de(n) kritiske frem for andre i en given situation?
- Hvilke områder skal prioriteres til gennemførelse af afværgeforanstaltninger?

## 8.3 Beskrivelse af modelværktøjets eventuelle begrænsninger og svagheder

I de foregående kapitler er de anvendte modellers resultater sammenlignet med såvel resultater af andre modeller som med de - meget begrænsede - eksperimentelle resultater fra forsøg i forurenede jord. Endvidere er modellernes følsomhed for variation i de parametre, der anvendes ved beregningerne, analyseret. Disse resultater sammenfattes nedenfor med henblik på en vurdering af modelværktøjets anvendelighed.

En generel svaghed ved validering af modellerne ved sammenligning med målte data er, at der ikke foreligger undersøgelser af koncentrationer af *de mobile* stoffer i planter dyrket i forurenede jord.

### 8.3.1 De enkelte modeller

Kartoffel- og gulerodsmodellerne har en tendens til at overestimere optaget i rodafgrøderne, men de forudsiger generelt størrelsesordenen på BCF-værdierne korrekt ved sammenligning med de (få) eksperimentelle data. Hvis det tillige antages, at biotilgængeligheden rundt regnet reduceres med en

faktor 2 ved ældning, vurderes de to modeller generelt at give realistiske forudsigelser af optaget i rodfrugter.

Modellerne til beskrivelse af optagelse i bladafgrøder under feltlignende forhold er ikke præcise, hvilket sandsynligvis skyldes, at jordstænk (især for de hydrofobe stoffer) er en meget væsentlig eksponeringsvej. Da jordstænk er meget afhængige af dyrknings- og vejrforhold, kan der næppe udvikles en deterministisk model til beskrivelse af denne eksponeringsvej. Målinger i felten med efterfølgende statistisk analyse er sandsynligvis den eneste farbare vej til at kvantificere jordstænks betydning for planteoptaget. Da valideringsstudierne imidlertid påviste, at modellerne tilsyneladende overestimerer koncentrationen i bladafgrøden (når der tages hensyn til jordstænk), og da det humane indtag af forureningskomponenter via bladafgrøder er af mindre betydning i forhold til indtag via rodafgrøder, vurderes det, at en meget præcis beskrivelse af planteoptaget i bladafgrøder ikke er nødvendig til risikovurdering af forurennet jord.

Den opstillede model til beskrivelse af optagelse i frugter har det ikke været muligt at validere på grund af manglende data. Betydningen af fordampning af stofferne fra frugterne er ikke medtaget i modellen, hvorfor den må forventes at overestimere koncentrationer af flygtige stoffer betydeligt. For mobile stoffer viste beregningerne, at optagelse i frugt kan være af væsentlig betydning for indtagelse af forureningskomponenter med spisning af frugt. Det er derfor vigtigt for en vurdering af modelværktøjets anvendelighed, at frugtræsmodellen bliver valideret.

### 8.3.2 Fællestræk ved modellerne

Modellerne tager i princippet højde for omsætning/nedbrydning af stofferne i planterne, men generelt kendes omsætningshastigheden ikke. Omsætningshastigheden sættes derfor automatisk til 0 i beregningerne, hvilket kan føre til overestimering af koncentrationerne i afgrøden. Dette er muligvis årsagen til, at koncentrationen af naphthalen i planter generelt var overestimeret af samtlige modeller. Travis & Arms-modellen kan dog inddirekte have omsætningen i planterne medtaget, da modellen er en korrelation opstillet på basis af feltmålinger, hvor nogle af stofferne, som indgår i korrelationsanalysen, kan være delvis omsat i planterne.

Ældningens betydning for stoffernes tilgængelighed i jorden er et spørgsmål, der endnu forskes i, og der er forskellige opfattelser af, hvorvidt og eventuelt hvordan den kan kvantificeres. Ældningen er muligvis delvis inddraget i Travis & Arms-modellen, da den netop, som før nævnt, bygger på feltmålinger.

Betydningen af ældningen er derfor kun inddraget i modelværktøjet ved at antage, at biotilgængeligheden reduceres med en faktor 2 ved ældning. Dette er vurderet at være konservativt for de fedtopløselige stoffer. Både beregningsresultater, hvor der er taget hensyn til ældning og hvor der ikke er taget hensyn til ældning, angives i regnearkene (men de er altså ikke medtaget i rapporten).

Modellerne til beregning af rodoptaget overestimerer generelt rodoptaget af de fedtopløselige stoffer, men tidligere valideringsstudier har vist, at modellerne er rimelige for de mindre fedtopløselige stoffer.

Modellerne til beregning af bladoptaget overestimerer generelt optaget af de fedtopløselige stoffer, når der tages hensyn til jordstænk, men tidligere valideringsstudier har vist, at modellerne er rimelige for de mindre fedtopløselige stoffer. Jordstænkenes betydning for optaget via blade er uden tvivl for konservativt modelleret.

### 8.3.3 Krav til modelværktøjet

Da modellerne er baseret på ligninger, der i simpel form beskriver meget komplekse processer, er det af betydning for troværdigheden af beregningerne, hvorvidt de anvendte forsimplinger og antagelser kan siges at afspejle de forhold, der modelleres - eller med andre ord: om de er realistiske. Dette er en forudsætning for, at modelberegningerne kan anvendes til risikovurderinger.

For det her udviklede modelværktøj er det grundlæggende spørgsmål: Kan beregninger bruges som udgangspunkt for en vurdering af, om indtagelse af organiske stoffer ved spising af afgrøder, der er dyrket i en given forurenede jord, vil kunne nå kritiske værdier?

Dette er forudsætningen for at kunne anvende værktøjet til afklaring af:

- om en forureningssituation udgør en sundhedsmæssig risiko i forbindelse med dyrkning og spising af afgrøder
- hvor omfattende afværgeforanstaltninger (typisk jordudskiftning), der er påkrævet af hensyn til efterfølgende dyrkning af afgrøder på arealet

Modelværktøjets begrænsning er først og fremmest, at det er baseret på en række konservative forudsætninger og parametre, der ikke vil være realistiske i alle situationer; det overestimerer med andre ord optagelsen i afgrøderne. Ved at basere risikovurderinger på beregningerne, vil vurderinger, der viser lav risiko – og dermed ikke behov for (yderligere) afværgeforanstaltninger - være velbegrundede, mens afværgeforanstaltninger, der er baseret på vurdering af høj risiko, i realiteten kan være unødvendige.

Desuden er der mangel på data fra feltundersøgelser til validering af modelværktøjet – specielt for mobile stoffer. Med tanke på at modellerne generelt overvurderer koncentrationen i afgrøderne, er dette specielt problematisk i forbindelse med frugttræsmodellen, der netop for de mobile stoffer bliver udslagsgivende, når modelberegningerne kobles med indtagelsen af de enkelte afgrøder.

De gennemførte beregninger og sammenligninger med det begrænsede datamateriale fra eksperimentelle undersøgelser viser dog, at modelværktøjet er fuldt på højde med tilsvarende værktøjer, der anvendes i andre lande, både hvad angår ”præcisionen” af estimerne og modellernes robusthed over for variationer i de enkelte parametre. De delmodeller for enkeltafgrøder (specielt kartoffel og frugttræer), der er udviklet og medtaget i værktøjet, øger desuden anvendeligheden betydeligt.

Der er derfor grundlag for praktisk anvendelse af det udviklede modelværktøj i forbindelse med udarbejdelse af retningslinier for risikovurdering af forurenede jord, men dertil kræves yderligere belysning af problemstillingen.

#### 8.4 Praktisk anvendelse af modelværktøjet

På baggrund af projektets resultater vurderes det, at følgende aktiviteter vil kunne danne grundlag for praktisk anvendelse af modelværktøjet:

- En første forudsætning for udarbejdelse af risikovurderinger baseret på modelberegningerne er, at der foreligger sundhedsmæssige vurderinger – f.eks. i form af værdier for acceptabel daglig indtagelse (ADI) - for de enkelte stoffer.
- Skal værktøjet kunne anvendes til vurdering af forureninger med mobile stoffer, bør der gennemføres undersøgelser, der kan be- eller afkræfte modellernes resultater, specielt forudsigelsen af at mobile stoffer vil blive optaget fra jorden og ophobet i frugter.
- Modelværktøjets anvendelighed kan vurderes ved gennemførelse af beregninger med forskellige scenarier, hvor de parametre, der indlægges i databaserne, baseres dels på "værst-tænkelige" forudsætninger (som de er nu), dels på mere realistiske forudsætninger.

Scenarierne kan sammensættes, så de illustrerer typiske forureningssituationer og afværgeforanstaltninger. Valget af "realistiske" parametre kan for hvert scenarie og stof vælges ud fra bedst mulige, fagligt baserede skøn for hvert enkelt tilfælde. Herunder kan inddragelse af et mål for fordampning fra frugter medtages i frugtræsmodellen.

Afhængigt af udfaldet af sådanne scenarieberegninger vil resultaterne kunne bruges til at opstille retningslinier for, hvordan risikoen i typiske forureningssituationer afklares, herunder omfanget af de nødvendige afværgeforanstaltninger.



# Symbolliste

Symbol	Forklaring	Enhed
a	Koefficient der indgår i beregning af plante-vand fordelingskoefficienten. Forklarer forskellen mellem vands og n-oktanols vægtfylde	
A	Bladareal	m <sup>2</sup>
a <sub>p</sub>	Koefficient, der beskriver hvor tæt på ligvægt koncentrationen er	
b	Koefficient der indgår i beregning af plante-vand fordelingskoefficienten. Forklarer forskellene sorption til oktanol og plantelipider	
BCF	Biokoncentreringsfaktor	
Bv	Biokoncentration faktor for vegetation	(mg/kg tør vægt plante) / (mg/kg tør jord)
C <sub>L</sub>	Koncentration i jordens poreluft	mg/m <sup>3</sup>
C <sub>L, Baggrund</sub>	Baggrundskoncentration i luften	mg/m <sup>3</sup>
C <sub>B</sub>	Koncentration i bulk jord	mg/kg våd bulk jord
C <sub>L</sub>	Koncentrationen i blad	
C <sub>M</sub>	Koncentration i jord matricen	mg/kg tør jord
C <sub>P</sub>	Koncentration i plante	mg/kg
C <sub>P,0</sub>	Koncentration i planten, hvis transport af stoffer fra jord på planten og ind i planten negligeres	mg/kg
C <sub>P,t</sub>	Koncentration i planten til tiden t	mg/kg
C <sub>S</sub>	Koncentration i jordens porevand	mg/m <sup>3</sup>
C <sub>Soil</sub>	Koncentration i jorden	mg/kg våd jord
C <sub>Stilk</sub>	Koncentration i stilk	mg/kg
C <sub>T</sub>	Total koncentration i jorden (våd vægt)	mg/kg
C' <sub>T</sub>	Total koncentration i jorden (tør vægt)	mg/kg
C <sub>XY</sub>	Koncentration i vandet i xylem (lige efter roden)	
D	Diffusionskoefficient	m <sup>2</sup> /dag
D <sub>L</sub>	Diffusionskoefficient i luft	m <sup>2</sup> /dag
D <sub>A,eff</sub>	Effektiv diffusionskoefficient i luft	m <sup>2</sup> /dag
D <sub>E</sub>	Effektiv diffusionskoefficient i jorden	m <sup>2</sup> /d
dw	Tørstofindholdet i frugt	kg/kg
D <sub>V</sub>	Diffusionskoefficient i vand	m <sup>2</sup> /dag
D <sub>V,eff</sub>	Effektiv diffusionskoefficient i vand	m <sup>2</sup> /dag
f <sub>A</sub>	Brøkdelen af stof, som er i luftfasen	
f <sub>W</sub>	Brøkdelen af stof, som er i vandfasen	
g	Ledningsevnen for transporten mellem luft og blade	m/d
H	Henrys lovkonstant	Pa·mol/m <sup>3</sup>
H <sub>E</sub>		
J	Stofflux	mg/m <sup>2</sup> /dag
J <sub>W</sub>	Volumen flow af ned gennem jordsøjlen	m/d
K <sub>AW</sub>	Luft-vand fordelingskoefficient	m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> eller L/L eller mL/mL
K <sub>CH</sub>	Kulhydrat-vand fordelingskoefficient	m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> eller L/L eller mL/mL
K <sub>D</sub>	Jord-vand fordelingskoefficient	L/kg
k <sub>E</sub>	Første ordens nedbrydningshastighedskonstant i planten	d <sup>-1</sup>
k <sub>E,Root</sub>	Første ordens nedbrydningshastighedskonstant i rødderne	d <sup>-1</sup>
k <sub>G</sub>	Første ordens væksthastighedskonstant	d <sup>-1</sup>
K <sub>LA</sub>	Blad-luft fordelingskoefficient	L/L
K <sub>LW</sub>	Blad-vand fordelingskoefficient	L/L
K <sub>OA</sub>	Oktanol-luft fordelingskoefficient	L/kg
K <sub>OC</sub>	Organisk kulstof-vand fordelingskoefficient	L/kg
K <sub>OW</sub>	Oktanol-vand fordelingskoefficient	mol/L·(mol/L) <sup>-1</sup>
K <sub>PW</sub>	Kartoffel-vand fordelingskoefficient	L/L

Symbol	Forklaring	Enhed
$K_{sorp}$	Sorptionshastighed	timer <sup>-1</sup>
$K_{VB}$	Fordelingskoefficient for fordelingen mellem vegetationslaget og jord	L/kg
$K_{Wood,W}$	Fordelingskoefficient mellem vedvæv og vand	(mg/kg tør træ)·(mg/L) <sup>-1</sup>
L	Lipidindhold i en plantedel	kg/kg
log $K_{OW}$	10-tal logaritmen til $K_{OW}$	
$L_x$	Længden på forureningsområdet	m
$m_A$	Samlet mængde i jordens poreluft	g/m <sup>3</sup>
$m_L$	Mængde af stof i bladene	mg
$m_R$	Mængde af stof i rødderne	mg
$m_W$	Samlet mængde i jordens porevand	g/m <sup>3</sup>
$f_{OC}$	Indhold af organisk kulstof i jord	kg/kg
P	Damptryk	Pa
$V_L$	Volumen fraktion luft i jord	m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup>
$V_V$	Volumen fraktion vand i jord	m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup>
Q	Transpirationsflow	m <sup>3</sup> /dag
$Q_W$	Vandflow til frugten	L/kg
$Q_{XY}$	Transpiration flow	m <sup>3</sup> /dag
r	Radius af rodafgrøde	m
R	Fraktion jord på plante i forhold til den totale plantevægt (plante+jord)	-
RCF	Rodkoncentreringsfaktor	
SCF	Stängelkoncentreringsfaktor i forhold til transpirationsvæsken	
$S_W$	Vandopløselighed	g/m <sup>3</sup>
SXCF	Stängelkoncentreringsfaktor	
t	Tiden	d
N	"Snoningsfaktor" beskrivende den forlængede transportvej grundet i at kemikaliet skal uden om faste partikler	
T	Absolut temperatur	K
TFnet	Netto overføringsfaktor (jordpartikler på planten)	-
TSCF	Transpiration Stream Concentration Factor	-
v	Vindhastigheden	m/s eller m/d
$V_E$	Effektiv transporthastighed med jordens vand	m/d
$V_L$	Bladvolumen	m <sup>3</sup>
W	Vandindhold i en plantedel	kg/kg
$w_P$	Vægt af planten uden jord	kg
$w_S$	Vægt af jordpartikler på planten	kg
$w_i$	Vægt af planten med jord	kg
X	Tykkelse af dæklag	m
z	Dybde	m
$\alpha$	Overordnet første ordens fjernelseskonstant	d <sup>-1</sup>
$\beta$	Total tilførselshastighed til plante	mg/m <sup>3</sup> /dag
$\delta_{luft}$	Tykkelse af stillestående luftlag. Anvendt i Jurys model	m
$\mu$	Første ordens nedbrydningshastighedskonstant	d <sup>-1</sup>
d	Jordens bulkdensitet (våd jord)	kg/L
d'	Jordens bulkdensitet (tør jord)	kg/L
$d_{Rod}$	Røddernes densitet (våd vægt)	kg/L
$\Delta X$	Tykkelse af jordforureningslag	m

# Litteratur

Alexander, M. (1995): How toxic are toxic chemicals in soil?. *Environ. Sci. Technol.* 29, 2713-2717.

Anderson, M.A. & J.C. Parker (1990): Sensitivity of organic contaminant transport and persistence models to Henry's Law constants: case of polychlorinated biphenyls. *Water, Air and Soil Pollution* 50, 1-18.

Barret, M. (1995): Metabolism of herbicides by cytochrome P 450 in corn. *Drug metabolism and drug interactions* 12, 299-315.

Behrendt, H. & M. Matthies (1995): Dynamics of leaching, uptake, and translocation: The simulation network atmosphere-plant-soil (SNAPS). In S. Trapp & S.C. Mc Farlane (eds), *Plant Contamination - Modeling and Simulation of Organic Chemical Processes*. Lewis Pub., Boca Raton, Florida, USA, 215-254.

Berding, V., S. Schwartz, S. Trapp & M. Matthies (2000): Validierung vom Umweltexpositionsmodellen und in Modellen verwendeten Parametern. Im Auftrag des Umweltbundesamtes, F+E Projekt FKZ 296 67 075. Available from <http://www.usf.uni-osnabrueck.de/projects/david/> Dec 2001; See also the Schwartz (2000).

Boersma, L., F.T. Lindstrom, S.C. Mc Farlane & E.L. McCoy (1988): Uptake of organic chemicals by plants: a theoretical model. *Soil Sci.* 146: 403-417.

Boersma, L., S.C. Mc Farlane & F.T. Lindstrom (1991): Mathematical model of plant uptake and translocations of organic chemicals: application to experiments. *J. Environ. Qual.* 20, 137-146.

Briggs, G.G., R.H. Bromilow & A.A. Evans (1982): Relationship between lipophilicity and root uptake and translocation of non-ionised chemicals by barley. *Pestic. Sci.* 13: 495-504.

Briggs, G.G., R.H. Bromilow, A.A. Evans & M. Williams (1983): Relationships between lipophilicity and the distribution of non-ionised chemicals in barley shoots following uptake by the roots. *Pestic. Sci.* 14, 492-500.

Bromilow, R.H. & K. Chamberlain (1995): Principles governing uptake and transport of chemicals. In Trapp S & Mc Farlane C (Eds.) 'Plant Contamination: Modeling and Simulation of Organic Chemical Processes'. Lewis Pub., Boca Raton, pp 37.

Brusseau, M.L. & P.S.C. Rao (1989): The Influence of Sorbate-Organic Mater interactions on Sorption Nonequilibrium. *Chemosphere*, 18(9/10), 1691-1706.

Burken, J.G. & J.L. Schnoor (1998): Predictive relationships for uptake of organic contaminants by hybrid poplar trees. *Environ. Sci. Technol.* 32, 3379-3385.

California Environmental Protection Agency (1993): CalTOX Draft final reports. The Office of Scientific Affairs, Department of Toxic Substances Control, California Environmental Protection Agency, Sacramento, California, 1993.

Carmichael, L.M., R.F. Christman & F.K. Pfaender (1997): Desorption and mineralization kinetics of phenanthrene and chrysene in contaminated soils. *Environ. Sci. Technol.* 31, 126-132.

Carslaw, H.S. & J.C. Jaeger (1933): *Conduction of heat in solids*. 2nd ed. Oxford, At the Clarendon Press.

Chiou, C.T., G. Sheng & M. Manes (2001): A partition-limited model for the plant uptake of organic contaminants from soil and water. *Environ. Sci. Technol.* 35, 1437-1444.

Chung, N. & M. Alexander (1998): Differences in sequestration and bioavailability of organic compounds aged in dissimilar soils. *Environ. Sci. Technol.* 32, 855-860.

Chung, N. & M. Alexander (2002): Effects of soil properties on bioavailability and extractability of phenanthrene and atrazine in sequestered soil. *Chemosphere* 48, 109-115.

Collander, R (1954): The permeability of Nitella cells to non-electrolytes. *Physiologica Plantarum* 7, 421-445.

Collins, C. (2001): Presentation at the SETAC Organic Soil Contaminants Congress in København, September 2001; no details available.

Cornejo, J.J., F.G. Muñoz, C.Y. Ma & A.J. Stewart (1999): Studies on decontamination of air by plants. *Ecotoxicology* 8, 311-320.

Crank, S. (1970): *The Mathematics of Diffusion*. Oxford Univ. Press, Oxford, UK.

Del Castillo, P. & W.J. Chardon (1995): Uptake of soil cadmium by three field crops and its prediction by a pH-dependent Freundlich sorption model. *Plant and Soil* 171, 263-266.

Delschen, T., A. Hembrock-Heger & U. Necker (1996): Systematische Untersuchungen zum Verhalten von PAK und PCB im System Boden/Pflanze auf der Lysimeter-Anlage Waldfeucht (1989-1994). In Landesumweltamt NRW, eds, *Materialien zur Ermittlung und Sanierung von Altlasten*, LUA Essen, Germany, pp 1-214.

Delschen, T., A. Hembrock-Heger, J. Liesner-Saaber & D. Sopcak (1999): Verhalten von PAK im System Boden/Pflanze. *UWSF-Z.Umweltchem. Ökotox.* 11, 79-87.

Dreicer, M., T.E. Hakonson, G.C. White & F.W. Whicker (1984): Rainsplash as a mechanism for soil contamination of plant surfaces. *Health Physics* 46, 177-187.

EC European Commission (1996): Technical Guidance Document in Support of Commission Directive 93/67/EEC on Risk Assessment for new Notified Substances and Commission Regulation (EC) No 1488/94 on Risk Assessment for Existing Substances. Luxembourg: Office for Official Publications of the European Communities.

EC European Commission (1996a): EUSES, the European Union System for the Evaluation of Substances. National Institute of Public Health and the Environment (RIVM), The Netherlands. Available from the European Chemicals Bureau (EC/DG XI), Ispra, Italy.

EC European Commission (2002): Technical Guidance Document in Support of Commission Directive 93/67/EEC on Risk Assessment for new Notified Substances and Commission Regulation (EC) No 1488/94 on Risk Assessment for Existing Substances and Directive 98/8/EC of the European Parliament of the Council concerning the placing of biocidal products on the market. Draft guidance document.

Elmadfa, I., W. Aign, E. Muskat, D. Fritzsche & H.-D. Cremer (1990): Die große GU-Nährwerttabelle. Gräfe and Unzer, Munich, 2nd ed.

Ewers, U. & R. Suchenwirth (1996): Expositionsabschätzung: Human-Biomonitoring vs. Modellrechnungen. *UWSF-Z.Umweltchem. Ökotox.* 8, 213-220.

Franke, W. (1987): *Nutzpflanzenkunde*. Thieme Verlag, Stuttgart, Germany.

Groom, C.A., A. Halasz, L. Paquet, N. Morris, L. Olivier, C. Dubois & J. Hawari (2002): Accumulation of HMX (octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine) in indigenous and agricultural plants grown in HMX-contaminated anti-tank firing-range soil. *Environ. Sci. Technol.* 36, 112-118.

Hamon, R.E., S.E. Lorenz, P.E. Holm, T.H. Christensen & S.P. McGrath (1995): Changes in trace metal species and other components of the rhizosphere during growth of radish. *Plant, Cell and Environment* 18, 749-756.

Hsu, F.C., R.L. Marxmiller & A.Y.S. Yang (1990): Study on root uptake and xylem translocation of cinmethylin and related compounds in detopped soybean roots using a pressure chamber technique. *Plant Physiol.* 93: 1573-1578.

Huber, B. (1956): *Die Saftströme der Pflanzen*. Springer, Berlin.

Hung, H. & D. Mackay (1997): A novel and simple model of the uptake of organic chemicals by vegetation from air and soil. *Chemosphere* 35, 959-977.

Hülster, A., J.F. Mueller & H. Marschner (1994): Soil-plant transfer of polychlorinated dibenzo-p-dioxins and dibenzofurans to vegetables of the cucumber family (Cucurbitaceae). *Environ. Sci. Technol.* 28: 1110-1115.

- Jager, D.T. & T. Hamers (1997): Estimation methods for bioaccumulation in risk assessment of organic chemicals. RIVM report No 679102013, Bilthoven, NL.
- Jager, D.T. (1998, ed.): Evaluation of EUSES: inventory of experiences and validation activities. RIVM report No 679 102 048, Bilthoven, NL.
- Jost, W. (1937): Cited in Jost W (1960): Diffusion in Solids, Liquids and Gases. Academic Press, New York, 3rd ed, p 69.
- Jury, A.W., D. Russo, G. Streile & H. El Abd (1990): Evaluation of volatilization by organic chemicals residing below the soil surface. *Water Resources Res.* 26, 13-20.
- Jury, A.W., W.F. Spencer & W.J. Farmer (1983): Behaviour Assessment Model for Trace Organics in Soil: I. Model description. *J. Environ. Qual.* 12, 558-564; erratum 16, 448 (1987).
- Kaupp, H. (1996): Atmosphärische Eintragswege und Verhalten von polychlorierten Dibenzo-p-dioxinen und -furanen sowie polyzyklischen Aromaten in einem Maisbestand. Doctoral Thesis at the Faculty of Biology, Chemistry and Earth Science at the University of Bayreuth, Germany.
- Kelsey, J.W. & M. Alexander (1997): Declining bioavailability and inappropriate estimation of risk of persistent compounds. *Environ. Toxicol. Chem.* 16 (3), 582-585.
- Kelsey, J.W., B.D. Kottler & M. Alexander (1997): Selective chemical extractants to predict bioavailability of soil-aged organic chemicals. *Environ. Sci. Technol.* 31, 214-217.
- Kleier, D.A. (1988): Phloem mobility of xenobiotics. *Plant Physiol.* 86, 803-810.
- Knoche, H., M. Klein, W. Kördel, U. Wahle, K. Hund, J. Müller & W. Klein (1995): Literaturstudie zur Ableitung von Bodengrenzwerten für polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe. Umweltbundesamt Berlin, Report 107 03 007/14.
- Komossa, D., C. Langebartels & H. Sandermann jr (1995): Metabolic processes for organic chemicals in plants. In Trapp S, McFarlane C (eds), *Plant Contamination - Modeling and Simulation of Organic Chemical Processes*. Lewis Pub., Boca Raton, Florida, USA, 69-103.
- Larsen, L.C., K.C. Zambrano, H. Christiansen, A. Köhler, U. Karlson & S. Trapp (2001): Bepflanzung einer Tankstelle mit Weiden. *UWSF-Z.Umweltchem.Ökotox.*, 13, 227-236.
- Li, J.G., M.H. Gerzabek & K. Mück (1994): An experimental study on mass loading of soil particles on plant surfaces. *Die Bodenkultur* 45,15-24.
- Lindstrom, F.T., L. Boersma & C. McFarlane (1991): Mathematical model of plant uptake and translocations of organic chemicals: development of the model. *J. Environ. Qual.* 20, 129-136.

Lyman, W.J., W.F. Reehl & D.H. Rosenblatt (1982): Handbook of Chemical Property Estimation Methods. Environmental Behaviour of Organic Compounds. McGraw-Hill Book Company.

Mackay, A.A. & P.M. Gschwend (2000): Sorption of monoaromatic hydrocarbons to wood. Environ. Sci. Technol. 34, 839-845.

Mackay, D., W.Y. Shiu & K.C. Ma (1993): Illustrated handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. Vol. III. Lewis Pub., Boca Raton, USA.

Mc Crady, J., C. Mc Farlane & L. Gander (1990): The Transport and Fate of 2,3,7,8-TCDD in Soybean and Corn. Chemosphere 21, 359-376.

Miglioranza, K.S.B., J.E. Aizpun de Moreno, V.J. Moreno, M.L. Osterrieth & A.H. Escalante (1999): Fate of organochlorine pesticides in soils and terrestrial biota of "Los Padres" pond watershed, Argentina. Environ. Poll. 105, 91-99.

Miljøstyrelsen (1996a): Humantoksikologiske vurderinger i forbindelse med depotindsatsen. Arbejdsrapport fra Miljøstyrelsen nr. 16 1996. København. 186 pp.

Miljøstyrelsen (1996b): Anvendelse af affaldsprodukter til jordbrugsformål. Bilagsdel til Miljøprojekt 328. Arbejdsrapport fra Miljøstyrelsen nr. 47 1996. København. 154 pp + bilag.

Miljøstyrelsen (1998): Oprydning på forurenede lokaliteter. Vejledning fra Miljøstyrelsen, nr. 6 1998.

Miljøstyrelsen (2000): Rådgivning af beboere i lettere forurenede områder. Vejledning fra Miljøstyrelsen, Nr. 7 2000.

Nakajima, D., E. Kojima, S. Iwaya, J. Suzuki & S. Suzuki (1996): Presence of 1-hydroxypyrene conjugates in woody plant leaves and seasonal changes in their concentrations. Environ. Sci. Technol. 30: 1675-1679.

Nardi, S., F. Reniero & G. Concheri (1997): Soil organic matter mobilization by root exudates of three maize hybrids. Chemosphere, 35, 2237-2244.

Neumann, G., A. Hülster & H. Marschner (1996): Identifizierung PCDD/F-mobilisierender Verbindungen in Wurzelexsudaten von Zucchini. Veroeff. PAOe 16: 513-528.

Newman, L.A., S.E. Strand, N. Choe, J. Duffy, G. Ekuan, M. Ruzaj, B.B. Shurtleff, J. Wilmoth, P. Heilman & M.P. Gordon (1997): Uptake and biotransformation of trichloroethylene by hybrid poplars. Environ. Sci. Technol. 31: 1062-1067.

Paretzke, H.G. & J.A. Garland: Assessment of the radiological significance of surface contamination in entrained radioactivity. Final Report, EC-contract No. 90-ET-015; no year given.

Paterson, S., D. Mackay & C. McFarlane (1994): A model of organic chemical uptake by plants from soil and the atmosphere. Environ. Sci. Technol. 28, 2259-2266.

- Paterson, S., D. Mackay, D. Tam & W.Y. Shiu (1990): Uptake of organic chemicals by plants: a review of processes, correlations and models. *Chemosphere* 21(3), 297-331.
- Pflugmacher, S. & P. Schröder (1995): Glutathione S-transferases in trees: inducibility by various organic xenobiotics. *Z Pflanzenernähr Bodenk* 158, 71-73.
- Pignatello, J.J. & B. Xing (1996): Mechanisms of slow sorption of organic chemicals to natural particles. *Environ. Sci. Technol.* 30, 1-11.
- Pinder III, J.E. & K.W. McLeod (1989): Mass loading of soil particles on plant surfaces. *Health Physics* 37, 935-942.
- Pinder III, J.E., K.W. McLeod, R.F. Lide & K.C. Sherrod (1991): Mass loading of soil particles on a pasture grass. *J. Environ. Radioactivity*, p. 341-354.
- Polder, M.D., E.M. Hulzebos & D.T. Jager (1998): Bioconcentration of gaseous organic chemicals in plant leaves: comparison of experimental data with model predictions. *Environ. Toxicol. Chem.* 17, 962-968.
- Polder, M.D., E.M. Hulzebos & D.T. Jager (1996): Validation of models on uptake of organic chemicals by plant roots. *Environ. Toxicol. Chem.* 14, 1615-1623.
- Reid, B.J., K.C. Jones & K.T. Semple (2000): Bioavailability of persistent organic pollutants in soils and sediments – a perspective on mechanisms, consequences and assessment. *Environ. Poll.* 108, 103-112.
- Richter, G. (1998): *Stoffwechselphysiologie der Pflanzen*. Thieme, Stuttgart, Germany, 6th ed. (in German).
- Riederer, M. (1995): Partitioning and Transport of ORganic Chemicals between the Atmospheric Environment and Leaves. I Trapp S & Mc Farlane C (Eds.) 'Plant Contamination: Modeling and Simulation of Organic Chemical Processes'. Lewis Pub., Boca Raton.
- Rikken, M.G.J., J.P.A. Lijzen & A.A. Cornelese (2001): Evaluation of model concepts on human exposure. Proposals for updating the most relevant exposure routes of CSOIL. RIVM report 711 701 022, Bilthoven, NL.
- Rippen, G. (1996-2000): *Handbuch Umweltchemikalien*. Permanently actualized edition, ecomed, Landsberg am Lech, Germany.
- Ryan, J.A., R.M. Bell, J.M. Davidson & G.A. O'Connor (1988): Plant uptake of non-ionic organic chemicals from soils. *Chemosphere* 17, 2299-2323.
- Samsøe-Petersen, L., E.H. Larsen, N.L. Andersen & P.B. Larsen (2000): Optagelse af metaller og PAH-forbindelser i grøntsager og frugt. Dyrkningsforsøg og prøveindsamling i København og Skagen 1999 Miljøprojekt Nr. 571, 2000. Miljøstyrelsen, København. 170 pp, [www.mst.dk/udgiv/Publikationer/2000/87-7944-304-4/html/default.htm](http://www.mst.dk/udgiv/Publikationer/2000/87-7944-304-4/html/default.htm)



- Samsøe-Petersen, L., E.H. Larsen, P.B. Larsen, N.L. Andersen & P. Bruun (2002): Uptake of trace elements and PAHs by fruit and vegetables from contaminated soils, *Experimental. Environ. Sci. Technol.* 36(14), 3057-3063.
- Sandermann, H. (1994): Higher plants metabolism of xenobiotics: the 'green liver' concept. *Pharmacogenetics* 4: 225-241.
- Sanders, P.F. & A.H. Stern (1994): Calculation of soil cleanup criteria for carcinogenic volatile organic compounds as controlled by the soil-to-indoor air exposure pathway. *Environ. Toxicol. Chem.* 13, 1367-1373.
- Scheunert, I., E. Topp, A. Attar & F. Korte (1994): Uptake Pathways of Chlorobenzenes in Plants and Their Correlation with N-Octanol/Water Partition Coefficients. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 27 (1): 90-104.
- Schroll, R., B. Bierling, G. Cao, U. Dorfler, M. Lahaniati, T. Langenbach, I. Scheunert & R. Winkler (1994): Uptake pathways of organic chemicals from soil by agricultural plants. *Chemosphere*, 28 (2): 297-304.
- Schwartz, S. (2000): Quality Assurance of Exposure Models for Environmental Risk Assessment of Substances. Doctoral thesis, Department of Mathematics and Computer Science, University of Osnabrück, Germany. Available from <http://www.usf.uni-osnabrueck.de/projects/david/> Dec 2001
- Scribner, S.L., T.R. Benzing, S. Sun & S.A. Boyd (1992): Desorption and bioavailability of aged simazine residues in soil from a continuous corn field. *J. Environ. Qual.* 21, 115-120.
- Shone, M.G.T., O.B. Bartlett & A.V. Wood (1974): A comparison of the uptake and translocation of some organic herbicides and a systemic fungicide by barley. II. Relationship between uptake by roots and translocation to shoots. *J. Exp. Botany* 25, 401-409.
- Sicbaldi, F., G.A. Sacchi, M. Trevisan & A.A.M. Del Re (1997): Root uptake and xylem translocation of pesticides from different chemical classes. *Pestic. Sci.* 50, 111-119.
- Sitte, P., H. Ziegler, F. Ehrendorfer & A. Bresinsky (1991): *Lehrbuch der Botanik für Hochschulen*. Stuttgart: Gustav Fischer, 33rd ed.
- Syracuse (2002): <http://esc.syrres.com/>
- Tang, J. & M. Alexander (1999): Mild extractability and bioavailability of polycyclic aromatic hydrocarbons in soil. *Environ. Toxicol. Chem.* 18 (12) 2711-2714.
- Tang, J., H.-H. Liste & M. Alexander (2002): Chemical assays of availability to earthworms of polycyclic aromatic hydrocarbons in soil. *Chemosphere* 48, 35-42.
- Tang, J., M.J. Carroquino, B.K. Robertson & M. Alexander (1998): Combined effect of sequestration and bioremediation in reducing the bioavailability of polycyclic aromatic hydrocarbons in soil. *Environ. Sci. Technol.* 32, 3586-3590.

- Thomas, G.O., K.E.C. Smith, A.J. Sweetmann & K.C. Jones (1998): Further studies of the air-pasture transfer of polychlorinated biphenyls. *Env. Poll.* 102, 119-128.
- Trapp, S. & L. Pussemier (1991): Model calculations and measurements of uptake and translocation of carbamates by bean plants. *Chemosphere* 22, 327-339.
- Trapp, S. & M. Matthies (1995): Generic One-Compartment Model for Uptake of Organic Chemicals by Foliar Vegetation. *Environ. Sci. Technol.* 29, 2333-2338; Erratum 30, 360.
- Trapp, S. & M. Matthies (1997): Modeling Volatilisation of PCDD/F from Soil and Uptake into Vegetation. *Environ. Sci. Technol.* 31, 71-74.
- Trapp, S. & M. Matthies (1998): *Chemodynamics and environmental modeling*. Springer, Berlin.
- Trapp, S. & S. Schwartz (2000): Proposals to overcome limitations in the EU chemical risk assessment scheme. *Chemosphere* 41, 965-971.
- Trapp, S. (1995): Model for uptake of xenobiotics into plants. I Trapp S & Mc Farlane C (Eds.) 'Plant Contamination: Modeling and Simulation of Organic Chemical Processes'. Lewis Pub., Boca Raton.
- Trapp, S. (2000): Modeling uptake into roots and subsequent translocation of neutral and ionisable organic compounds. *Pest Manag. Sci. (formerly Pestic. Sci.)* 56, 767-778.
- Trapp, S. (2002): Dynamic root uptake model for neutral lipophilic organics. *Environ. Toxicol. Chem.* 21, 203-206.
- Trapp, S. (2002a): Ikke publicerede data og vurderinger.
- Trapp, S., K.S.B. Miglioranza & H. Mosbæk (2001): Sorption of Lipophilic Organic Compounds to Wood and Implications for their Environmental Fate. *Environ. Sci. Technol.* 35, 1561-1566.
- Trapp, S., M. Matthies & C. Mc Farlane (1994): Model for uptake of xenobiotics into plants: validation with bromacil experiments. *Environ. Toxicol. Chem.* 13, 413-422.
- Trapp, S., M. Matthies, I. Scheunert & E.M. Topp (1990): Modeling the Bioconcentration of Organic Chemicals in Plants. *Environ. Sci. Technol.* 24, 1246-1252.
- Trapp, S., Y.X. Zhang & H. Mosbæk (2002): Persistence of MTBE to metabolism by Danish vegetation. submitted.
- Travis, C. & A. Arms (1988): Bioconcentration in beef, milk and vegetation. *Environ. Sci. Technol.* 22, 271-274.
- US EPA (1995): Technical background document for soil screening guidance. EPA report 540/R-94/106, draft.

- Versluijs, C.W., R. Koops, P. Kreule & M.F.W. Waitz (1998): The accumulation of soil contaminants in crops, location-specific calculation based on the CSOIL module. Part 1: Evaluation and suggestion for model development. RIVM Report No 711 701 008, Bilthoven, NL.
- Voet, D., J.G. Voet & C.W. Pratt (1998): Fundamentals of biochemistry. John Wiley & Sons, New York.
- Voutsas, D., A. Grimanis & C. Samara (1996): Trace elements in vegetables grown in an industrial area in relation to soil and air particulate matter. *Environ. Poll.* 94(3), 325-335.
- Wagrowski, D.M. & R.A. Hites (1997): Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Accumulation in Urban, Suburban, and Rural Vegetation. *Environ. Sci. Technol.* 31(1), 279-282.
- Wild, S.R., K.C. Jones & A.E. Johnston (1992): The polynuclear aromatic hydrocarbon (PAH) content of herbage from a long term grassland experiment. *Atmospheric Environment*, 26A: 1299-1307.
- Wu, S.C. & P.M. Gschwend (1986): Sorption kinetics of hydrophobic organic compounds onto natural sediments and soils. *Environ. Sci. Technol.* 20, 717-725.
- Xing, B. & J.J. Pignatello (1997): Dual-model sorption of low-polarity compounds in glassy poly(vinyl chloride) and soil organic matter. *Environ. Sci. Technol.* 31, 792-799.



## Generic one-compartment model for uptake into aerial plant parts ("TGD-blad")

Trapp & Matthies (1995) proposed a dynamic one-compartment model for to estimate the uptake of organic chemicals by foliar vegetation. The model is a strict simplification of former work (Trapp *et al.* 1994). It is the model currently used in European risk assessment EUSES (EC 1996a), and proposed for CSOIL (the Netherlands, Versluijs *et al.* 1998).

Mass balance for aerial plants

The model assumes that anthropogenic organic chemicals are only taken up passively, i.e., by diffusion and advection. Processes considered are translocation to shoots, gaseous deposition on leaves, volatilization from leaves, metabolism and degradation processes, and dilution by exponential growth.

The mass balance is:

Change of chemicals mass in the aerial plant parts =  
 + flux from soil via xylem to the shoots  
 ± gaseous flux from/to air  
 - photodegradation - metabolism

Expressed in mathematical terms:

$$\begin{aligned} dm_L/dt &= d(C_L \cdot V_L)/dt \\ &= Q \cdot TSCF \cdot C_W + A \cdot g \cdot (C_A - C_L/K_{LA}) - k_E \cdot m_L \end{aligned} \quad \text{Equation 1}$$

where

$m_L$  is the mass of chemical in the leaves  
 $C_L$  is the concentration  
 $V_L$  is the volume of the leaves (default 0.002 m<sup>3</sup>)  
 $Q$  is the amount of transpired water per time (default 1 L/d)  
 $A$  is the leaf surface area (default 5 m<sup>2</sup>),  
 $g$  is the leaf to air conductance (default 0.001 m/s)  
 $C_A$  is the concentration of chemical in air  
 $k_E$  is an elimination rate (1/s)

Assuming that the growth is exponential with the rate  $k_G$  (default 0.035 d<sup>-1</sup>) and assuming that the ratios  $A/V_L$  and  $Q/V_L$  are constant, it follows for the change of the concentration with time  $dC_L/dt$ :

$$\frac{dC_L}{dt} = -[A \cdot g / (K_{LA} \cdot V_L) + k_E + k_G] \cdot C_L + C_W \cdot TSCF \cdot Q / V_L + C_A \cdot g \cdot A / V_L \quad \text{Equation 2}$$

### Analytical solution for constant conditions

Taking the parameters on the right side of the equation as constants yields a linear differential equation of first order with the general solution:

$$\frac{dC_L}{dt} = -\alpha \cdot C_L + \beta \quad \text{Equation 3}$$

where

$$\alpha = A \cdot g / (K_{LA} \cdot V_L) + k_E + k_G \text{ (sink terms)} \quad \text{Equation 4}$$

$$\beta = C_W \cdot TSCF \cdot Q / V_L + C_A \cdot g \cdot A / V_L \text{ (source terms)} \quad \text{Equation 5}$$

With an initial  $C_L(0)$  the analytical solution of the equation is:

$$C_L(t) = C_L(0) \cdot \exp(-\alpha \cdot t) + \beta / \alpha [1 - \exp(-\alpha \cdot t)] \quad \text{Equation 6}$$

The steady-state concentration ( $t \rightarrow \text{infinite}$ ,  $dC_L/dt \rightarrow 0$ ) is:

$$C_L(t \rightarrow \text{infinite}) = \beta / \alpha \quad \text{Equation 7}$$

The time to reach steady-state (95%) is:

$$t(95\%) = -\ln 0.05 / \alpha \quad \text{Equation 8}$$

### Limitations

The approach was developed for non-ionic organic substances only. Calculated concentrations correspond to the aerial plant compartment, mainly foliage. Concentrations in fruit can deviate greatly. Exponential growth is assumed. This is only valid for plants that are harvested before maturation, e.g. green fodder, green vegetables and lettuce. Deposition by aerosols, which is not considered, can be important for particle-bound compounds. The empirical parameters used in the equation ( $K_{LA}$ , TSCF) were derived from a small number of experiments. The given parameterization is not for a specific plant, but represents average values. Moreover, properties were taken as constant. This is comfortable for the mathematical solution of the equation, but is not very realistic and can lead to error. The equation is of a generic type and not necessarily applicable for real situations.

Although these limitations had been clearly stated by the authors, the model is used for *all* chemicals in the current risk assessment approach of the EU, although applicable only for a minority. This has been criticized (Trapp & Schwartz 2000).

## The "Carrot Model"

The "Carrot model" is a flux-based dynamical equation, which is solved for the steady-state (Trapp 2002). It considers advective influx with the transpiration stream as input, and outflux and metabolism as output. Dilution by growth may occur. Diffusive uptake is assumed to be restricted to the peel, which is not consumed. This assumption has been shown to be valid for very lipophilic compounds such as benzo(a)pyrene and PCB (Trapp 2002).

The assumption of chemical equilibrium is probably justified for thin roots (Trapp 1995), but not necessarily for thick roots, because the diffusive flux is proportional to the surface area. In particular for thicker roots and lipophilic chemicals, real concentrations can be far below chemical equilibrium. This means, that in the risk assessment process, risk from uptake of lipophilic into roots is currently probably overestimated. Therefore, a new, flux based approach was developed (Trapp 2002).

The value of  $K_{RW}$  which is used in this model differs in units and parameterization and is

$$K_{RW} = W + L \cdot a \cdot K_{OW}^b \quad \text{Equation 9}$$

where

- W is the water content (mass per mass)
- L is the lipid content (mass per mass),
- b is 0.77 (Briggs' value for roots)
- a is a factor correcting density differences between water and n-octanol (1.22).

If only the peel of a root vegetable is in diffusive exchange with the surrounding soil, the core is loaded solely with the water taken up. Then, for this core, uptake is with the transpiration stream  $Q$  (L/d) and loss is by flux upward and metabolism  $k_{E,Root}$  ( $d^{-1}$ ):

$$\begin{aligned} dm_R/dt &= d(V \cdot C_R)/dt = k_{G,Root} \cdot V \cdot C_R + V \cdot dC_R/dt \\ &= C_W \cdot Q - C_{XY} \cdot Q - k_{E,Root} \cdot V \cdot C_R \end{aligned} \quad \text{Equation 10}$$

where

- $m_R$  is the mass of chemical in roots
- $C_W$  is the concentration in the soil solution, calculated as described (mg/L).
- $C_{XY}$  is the concentration in the xylem (mg/L) at the outflow of the root. If the xylem sap is in equilibrium with the root,  $C_{XY}$  is  $C_R/K_{RW}$ ;  $k_{E,Root}$  is a first order metabolic rate.
- V is the volume of the root. The volume is assumed to increase exponentially with time with the rate constant  $k_{G,Root}$ .

The steady-state solution for the dynamic (steady-state) bioconcentration factor between root core and soil solution BCF(W) is

$$\text{BCF}(W) = \frac{C_R}{C_W} = \frac{Q}{\frac{Q}{K_{RW}} + k \cdot V} \quad \text{Equation 11}$$

where

$k$  is the sum of  $k_{G,Root}$  and  $k_{E,Root}$   
 $V$  is the root volume (L)

In the absence of metabolism and growth ( $k = 0$ ), the concentration ratio  $C_R/C_W$  equals the thermodynamic equilibrium  $K_{RW}$ .

The ratio between the concentration in root and soil is simply obtained by multiplication with the factor  $f_W = C_W/C_{Soil}$

$$\text{BCF}(W) = \frac{C_R}{C_{Soil}} = \frac{Q \cdot f_W}{\frac{Q}{K_{RW}} + k \cdot V} \quad \text{Equation 12}$$

A default parameterization of the equation is listed in Table B.1.

#### Limitations

The model approach is strictly limited to non-ionizing and lipophilic compounds with a low vapour pressure, and to peeled root vegetables. Only for the compounds with a  $\log(K_{ow}/K_{aw}) > 8$ , diffusion through the peel into the core can be neglected. This holds, e.g., for PCB and PCDD/F with more than four chlorine, benzo(a)pyrene, fluoroanthene and six-ring PAH, but not for benzene and naphthalene, and not for hexane, octane, dodecane.

Table B.1  
 Default parameters of the carrot model (Trapp 2002)

Parameter	Symbol	Value	Unit
Root water content	$W$	0.89	g/g
Root lipid content	$L$	0.025	g/g
Density correction	$a$	1.22	(-)
Empirical factor	$b$	0.77	(-)
Transpiration stream	$Q$	1	L/d
Root volume	$V$	1	L
1 <sup>st</sup> order rate	$k = k_{G,Root} + k_{E,Root}$	0.1	d <sup>-1</sup>

#### Sensitivity analysis

Figure B.1 shows the result of this new flux based root uptake equation with varying loss rate  $k$  (0.1 and 0.01 d<sup>-1</sup> corresponding to a half time of 6.9 and 69 days) and  $\log K_{ow}$  of the chemical. It can be seen that for chemicals with low or intermediate lipophilicity ( $\log K_{ow} < 2$ ), the difference between equilibrium partitioning ( $k = 0$ ) and dynamic uptake equation is negligible. However, for the more lipophilic compounds, the difference is considerable, in particular for higher  $k$  values.



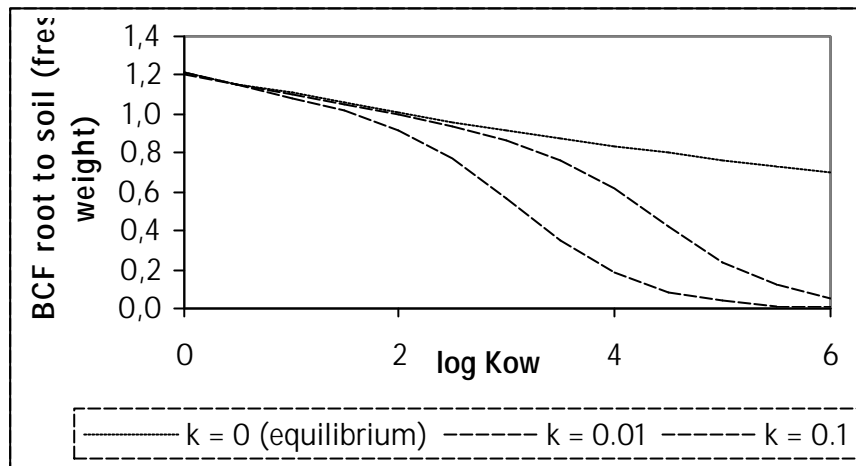


Figure B.1  
 Bioconcentration factor roots (fresh weight) to soil matrix simulated with the dynamic approach versus log  $K_{ow}$  for three values of  $k$ . Calculations made without chemical in the water fraction of roots and soil.



## Potato Model (Draft)

Potato is the vegetable with the highest production worldwide. In 1986, 308 548 million kg were produced, compared to, e.g., carrots with only 12 471 million kg (Franke 1989). Potato is also often homegrown in gardens. The consumption of potato, which is polluted with soil contaminants, may therefore pose an important risk to the exposed population. However, only a few studies are concerned with this issue, and available empirical data is limited.

In current risk assessment, e.g., for chemical risk assessment in the European Union, potato is considered being a "fine root", and uptake is calculated from the chemical equilibrium to soil (EC 1996). In reality, potato is not a root. The tuber is a storage organ and part of the stem (Franke 1989). It is not part of the root system, without connection to the xylem, and loaded from the assimilate stream in the phloem (Sitte *et al.* 1991). Advective transport of soil pollutants into the potato is therefore unlikely (the phloem is loaded in the leaves). Diffusive uptake of chemicals may occur, although potatoes have a low surface to volume ration, due to the spherical form. So when is diffusive uptake a relevant process? To answer this question, a "potato model", which estimates diffusion into a potato, is developed.

Potato Model - Diffusive Uptake into a Sphere

The "potato model" estimates diffusion into a sphere.

### *Diffusion into a plane sheet*

The analytical solution for diffusion in  $z$ -direction into a plane sheet without advection, growth or reaction and with constant concentration  $C_0$  at the surface  $z = 0$  has been used recently to calculate diffusion into a carrot (Trapp 2002) and is (Crank 1970):

$$C(z, t) = C_0 \cdot \operatorname{erfc} \frac{z}{\sqrt{4 \cdot D \cdot t}} \quad \text{Equation 13}$$

where

$D$  is the diffusion coefficient, here of a chemical in plant tissue (see below).

$C_0$  is the concentration in the potato at equilibrium between soil pore water and potato

$z$  is the distance from the surface

$t$  time

### *Diffusion into a sphere*

The diffusion into a sphere can be considered as symmetrical from all sides. Molecules from all directions arrive at the same time at the midpoint.

Mathematically, this is identical to a reflection at the centre of the sphere (Figure C.1).

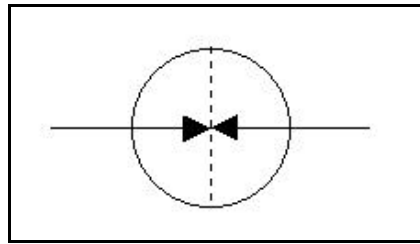


Figure C.1  
Image of the diffusion process into the sphere

Assuming the following boundary conditions:

- $t = 0: 0 \leq x < r: C(x,0) = 0$  (the initial concentration is zero). The situation simulated here is that a fully developed potato is put into the polluted soil at time  $t = 0$ . The actual situation is rather that the potato grow in the polluted soil together with that the chemical diffuse into the potato
- $x = 0$ : the flux is zero
- $x = r, t \geq 0: C(r,0) = C_0$

where

$r$  is the radius of the vegetable

$x$  is the distance to the centre

The solution is

$$C(x, t) = C_0 \cdot \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \cdot \operatorname{erfc} \frac{(2n+1) \cdot r - x}{\sqrt{4 \cdot D \cdot t}} + C_0 \cdot \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \cdot \operatorname{erfc} \frac{(2n+1) \cdot r + x}{\sqrt{4 \cdot D \cdot t}} \quad \text{Equation 14}$$

The solution above can solve the diffusion problem into a sphere. Interpret  $x = 0$  as the midpoint, and  $r$  as the radius. The sphere is divided into  $n$  layers of thickness  $dx$ . The average concentration in the sphere is found by:

$$C_R = \sum_{i=1}^{\frac{r}{dx}} \frac{C(i \cdot dx, t) \cdot [(i \cdot dx)^3 - ((i-1) \cdot dx)^3]}{r^3} \quad \text{Equation 15}$$

Figure C.2 gives an example of the difference between the solution for a plane sheet and a sphere with a radius of 4 cm, for  $t = 60$  days, and  $D$  between  $10^{-4}$  and  $10^{-6} \text{ m}^2/\text{d}$ . For small  $D$ , there is no difference between sphere and plane sheet: the reflection does not occur, because the molecules do not reach the centre in 60 days. For large  $D$  ( $>10^{-4} \text{ m}^2/\text{d}$ ), the sphere has throughout a concentration  $C > 0.99 C_0$ , whereas this requires a larger  $D$  (approx.  $D = 0.1 \text{ m}^2/\text{d}$ ) in case of the plane sheet. Generally, averaged concentrations in the sphere are higher, and equilibrium is reached earlier.

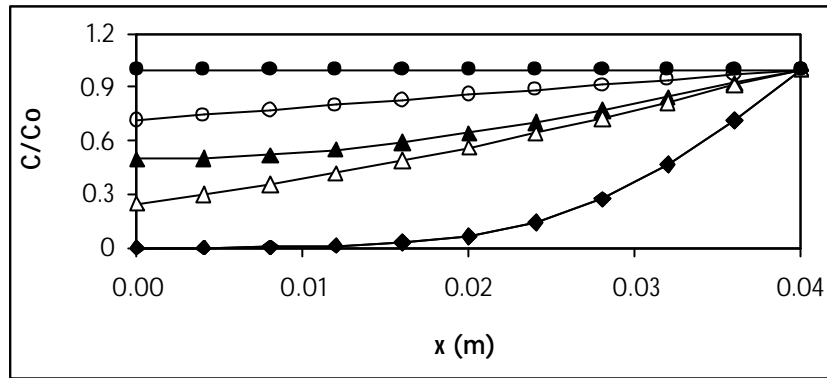


Figure C.2  
 Concentration profile in a sphere (open symbols) and a plane sheet (closed symbols) for  $r$  is 4 cm,  $t$  is 60 days and  $D$  is  $10^{-4}$  m<sup>2</sup>/d (bullets),  $10^{-5}$  m<sup>2</sup>/d (triangles) and  $10^{-6}$  m<sup>2</sup>/d (rhomboids; symbols overlap)

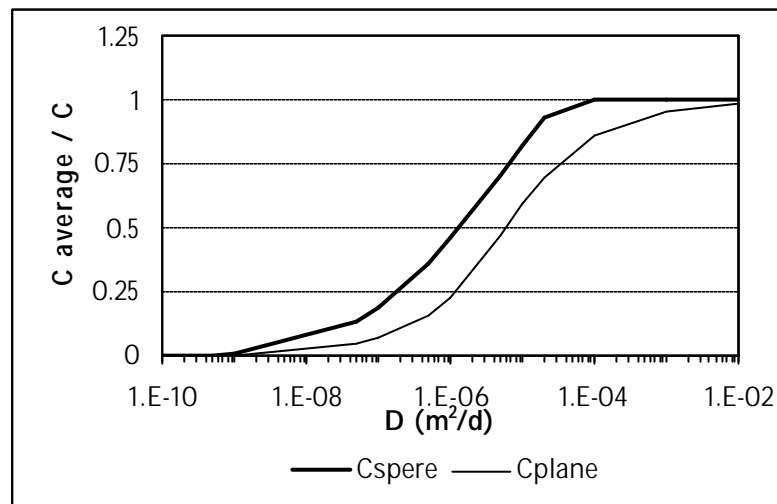


Figure C.3  
 Averaged concentration in a sphere with  $r$  is 4 cm and in a plane sheet for  $t$  is 60 d and for varying diffusion coefficients

### Parameterization of the Model for Potatoes

There are only two plant and chemical specific parameters in the equation, namely  $C_0$  and  $D$ .  $C_0$  describes the concentration at  $x = r$ , the outer peel of the potato. This concentration is calculated from local equilibrium with the surrounding soil:

$$C_0 = K_{PW} \cdot C_W = (L \cdot 1.22 \cdot \log K_{OW}^{0.77} + P_W + P_A \cdot K_{AW} + CH \cdot K_{CH}) \cdot C_W \quad \text{Equation 16}$$

where

$P_W$  is the volumetric water fraction of potato

$P_A$  is the volumetric gas fractions of potato

$K_{PW}$  is the partition coefficient potato to water

$C_W$  is the chemical concentration in the soil solution

$L$  is the lipid content of the potato (0.003 g/g, Fødevarerdirektoratet 2002)

CH is the fraction of carbohydrates (0.172, Fødevaredirektoratet 2002)  
 $K_{CH}$  is the partition coefficient to carbohydrates.

$$K_{CH} = \begin{cases} 0.1 & \text{for } \log K_{ow} < 0.2 \\ 0.2 & \text{for } 0.2 < \log K_{ow} < 0.9 \\ 0.5 & \text{for } 1 < \log K_{ow} < 1.9 \\ 1 & \text{for } 2 < \log K_{ow} < 2.9 \\ 2 & \text{for } 3 < \log K_{ow} < 3.9 \\ 3 & \text{for } \log K_{ow} > 4 \text{ (Chiou } et al. \text{ 2001)} \end{cases}$$

Values for water content of vegetables are well known, but can vary slightly. Here an average water content of 0.798 g/g (Fødevaredirektoratet 2002) is used. The volume fraction of air in potato was measured by setting potatoes in water at around 10°C in 3-4 days, and measuring the weight gain (DHI 2002, unpublished data). This weight gain was assumed caused by the replacement of air with water. The air volume fraction was measured to be 0.061. The volume fraction water was estimated from the volume fraction air in the potato, and from the content of carbohydrates and lipids assuming a density of 2 kg/L for carbohydrates and 0,8 kg/L for lipids. The volume fraction was estimated to 0.85.

The fraction of chemical present in the water and the gas phase of the potato,  $f_w$  and  $f_A$ , can be estimated from

$$f_w = P_w / (K_{pw} + P_w + P_A \cdot K_{AW}) \quad \text{Equation 17}$$

$$f_A = P_A \cdot K_{AW} / (K_{pw} + P_w + P_A \cdot K_{AW}) \quad \text{Equation 18}$$

The effective diffusion coefficients in water phase  $D_{w,eff}$  and gas phase  $D_{A,eff}$  of potato are calculated from

$$D_{w,eff} = T \cdot f_w \cdot D_w$$

$$D_{A,eff} = T \cdot f_A \cdot D_A$$

$$D = D_{w,eff} + D_{A,eff}$$

where

$T$  is a tortuosity factor reflecting physical hindrances. For wood,  $T \approx 0.01$  was found (Mackay & Gschwend 2000).

$D_w$  is the diffusion coefficients of the chemical in water (approx.  $5 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{d}$ )

$D_A$  is the diffusion coefficients of the chemical in gas phase (approx.  $1 \text{ m}^2/\text{d}$ )

The diffusion coefficient in potato  $D$  is the sum of  $D_{w,eff}$  and  $D_{A,eff}$ .

### Sensitivity Study

Values of  $D$  for the chemicals of interest are listed in Table C.1. By comparison with Figure C.3, it can be seen that the uptake is very small for chemicals with a  $D$  around or below  $10^{-9} \text{ m}^2/\text{d}$ , a value calculated for benzo(a)pyren. On the other hand, for all chemicals with a calculated  $D > 10^{-5} \text{ m}^2/\text{d}$ , the assumption of equilibrium (and therefore the use of the much easier equilibrium model) is justified. It is not so much the  $K_{ow}$ , which

determines the diffusion coefficient, but the ratio of  $K_{OW}$  to  $K_{AW}$ , also named  $K_{OA}$  (octanol-air partition coefficient). The higher the  $K_{OA}$ , the more chemical in the gas pores, where the diffusion process is much faster.

Table C.1  
Values of the calculated diffusion coefficient for chemicals of interest

Chemical	$\log K_{OW}$	$K_{AW}$	D (m <sup>2</sup> /d)
Naphthalene	3.36	0.0167	$2.7 \cdot 10^{-6}$
Benzo(a)pyrene	6.13	$1.39 \cdot 10^{-5}$	$2.7 \cdot 10^{-9}$
MTBE	1.14	0.0175	$6.4 \cdot 10^{-6}$
Toluene	2.75	0.22	$5.6 \cdot 10^{-5}$
n-Dodecane	5.8	307.7	$9.2 \cdot 10^{-4}$
Trichloroethene	3.03	0.34	$6.0 \cdot 10^{-5}$
Benzene	2.13	0.23	$7.3 \cdot 10^{-5}$
Tetrachloroethene	2.87	0.83	$1.4 \cdot 10^{-4}$

### Calculation

The calculated average concentration in potato tubers with the potato model is compared to the equilibrium concentration in Table C.2. In the case of the present study, the equilibrium assumption can be used for benzene, trichloroethylene, tetrachloroethene, toluene, n-dodecane, and almost for MTBE and naphthalene, but not for benzo(a)pyrene.

Table C.2  
Calculated bioconcentration in potatoes (mg/kg fresh fruits : mg/kg wet soil), diffusion model ( $C_R$ ) and chemical equilibrium (Eq.). Radius of the potato = 4 cm. Soil: organic carbon content = 2%

Compound	$C_R$	Eq.	$C_R(\text{Eq.})/C_R$
Naphthalene	0.14	0.24	1.7
Benzo(a)pyrene	$6.0E-04$	0.10	170
MTBE	1.99	2.73	1.4
Toluene	0.41	0.41	1.0
n-Dodecane	0.12	0.12	1.0
Trichloroethene	0.33	0.33	1.0
Benzene	0.93	0.93	1.0
Tetrachloroethene	0.36	0.36	1.0





# Fruit Tree Model

The tree model considers chemical influx into stem via xylem, outflux after equilibration, dilution by growth and first order metabolism (Trapp 2001). Exchange with air is neglected. The main difference between herbs or vegetables trees is the big wood compartment of trees with a mass of up to several hundred tons per ha. Wood is composed of cellulose, hemicellulose and lignin, which is a giant macromolecule with lipophilic sorption properties. The concentration ratio between wood and water named " $K_{Wood,W}$ " (mg chemical per g dry wood to mg chemical per ml water) is significantly correlated to the log  $K_{ow}$ , for oak (Trapp *et al.* 2001):

$$\log K_{Wood,W} = -0.266 (\pm 0.25) + 0.632 (\pm 0.063) \log K_{ow} \quad \text{Equation 19}$$

(n=27, r=0.90)

## Mass balance for the stem

Influx	$Q \cdot C_{XY}$	
Sinks	$k_E \cdot m + Q \cdot C_{Stem} / K_{Wood} = k_E \cdot M \cdot C_{Stem} + Q \cdot C_{Stem} / K_{Wood}$	
Change in mass in the stem	$dm/dt = M \cdot dC_{Stem}/dt + C_{Stem} \cdot dM/dt = M \cdot dC_{Stem}/dt + C_{Stem} \cdot k_G \cdot M$	Equation 20
Mass balance equation	$M \cdot dC_{Stem}/dt = Q \cdot C_{XY} - Q \cdot C_{Stem} / K_{Wood} - k_E \cdot M \cdot C_{Stem} - C_{Stem} \cdot k_G \cdot M$ or $dC_{Stem}/dt = (Q/M) \cdot C_{XY} - (Q/M) \cdot C_{Stem} / K_{Wood} - (k_E + k_G) \cdot C_{Stem}$	

*Steady-state solution* ( $dC_{Stem}/dt = 0$ ):

$$C_{Stem}(t = \infty) = \frac{C_{XY} \cdot \frac{Q}{M}}{\frac{Q}{M \cdot K_{Wood,W}} + (k_E + k_G)} \quad \text{Equation 21}$$

where

$m$  is mass of the chemical in the stem

$C_{XY}$  is the concentration of chemical in xylem sap.  $C_{XY}$  is estimated from the concentration in soil solution  $C_w$  by:  $C_{XY} = TSCF \cdot C_w$

$C_{Stem}$  is the concentration of chemical in stem

$k_G$  is the stem growth rate constant, which is set to 0.01 year<sup>-1</sup> in the calculations

$k_E$  is the first order metabolism rate constant (0.692 years<sup>-1</sup>)

$Q$  is the transpiration of the fruit tree stand (approx.  $3000 \text{ m}^3 \text{ ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$ )  
and  
 $M$  is the stem wood mass ( $100 \text{ t ha}^{-1}$ ).

The transpiration stream concentration factor (TSCF) is calculated by the correlation of Burken & Schnoor (1998) for poplars (corrected):

$$\text{TSCF} = 0.756 \cdot \exp [-(\log K_{ow} - 2.50)^2 / 2.58] \quad \text{Equation 22}$$

The calculated concentration ratio between stem and bulk soil with and without metabolism is shown in Table D.1. Chemicals with a low or medium  $\log K_{ow}$  have a potential to accumulate in significant amounts in the stem via xylem from soil. Very lipophilic chemicals have low steady-state concentrations in stem compared to the soil concentration, due to slow uptake and dilution by growth. If chemicals are metabolized in wood, chemicals with slow uptake (high lipophilicity) will decrease in concentration. The half-life of 1 year is given to illustrate that even slow rates can lower steady-state concentrations of the lipophilic compounds in wood significantly.

Table D.1  
Calculated steady-state concentration ratio between the concentration in the stem of an oak and bulk soil for different metabolism half-lives. 2% organic carbon in soil assumed.

Compound	$C_{\text{Stem}}/C_{\text{B}}$ No metabolism	$C_{\text{Stem}}/C_{\text{B}}$ Metabolic half-life 1 year
Naphthalene	3.61	1.37
Benzo(a)pyrene	$4.14 \cdot 10^{-3}$	$1.01 \cdot 10^{-4}$
MTBE	2.97	2.79
Toluene	5.89	3.51
n-Dodecane	$1.45 \cdot 10^{-2}$	$4.45 \cdot 10^{-4}$
Trichloroethene	4.90	2.43
Benzene	6.66	5.22
Tetrachloroethene	5.46	3.02

#### Concentration in fruit

Transport into fruits can occur both with the phloem sap and with the xylem sap. In fruits, all dry mass arrives via the phloem. Phloem sap has a high dry mass content, about 10%. This dry mass remains in the fruit. Therefore, we can assume that the phloem flow is approximately 10 times the dry mass content. Different to leaves, fruits do not transpire very much, approximately the same amount of water is additionally flowing to the fruit via the xylem, to replace water evaporated from the peels. Table D.2 gives the dry mass content of a number of fruits from trees (Elmadfa *et al.* 1991), and the calculated water flow per kg fruit (fresh weight).

$$Q_w = dw \cdot 20 \quad \text{Equation 23}$$

where

$Q_w$  is the water flow into 1 kg of fruit  
 $dw$  is the dry weight fraction of the fruit.

Although phloem loading with sugars occurs in the leaves, phloem concentrations of nonionized chemicals change toward the equilibrium with the stem. Thus the concentration of the chemical in the phloem sap is assumed to be the same concentration as within the xylem sap, which is calculated assuming chemical equilibrium between xylem and xylem sap.

The amount of chemical  $m$  transported with this water can then be calculated from the concentration in stem:

$$m = Q_W \cdot C_{\text{Stem}} / K_{\text{Wood,W}} \quad \text{Equation 24}$$

The concentration is then obtained by dividing the chemical mass  $m$  by the weight of the fruit (1 kg).

Table D.2  
Dry weight of popular Danish fruits, and estimated water flow per kg fresh fruit

Fruit	Water content	Dry mass content	Water flow (L/kg)
Hazelnut	5.6%	94.4%	18.88
Walnut	5.0%	95%	19
Apple	85.7%	15.6%	2.86
Blackberry	84.6%	15.4%	3.08
Cherry	81.6%	18.4%	3.68

An example calculation for a fruit tree stand with 100 tons/ha biomass and 300 mm/year transpiration, a metabolism half-life of one year of the chemical, and the water flux for nuts (19 L water flux per kg fruit) or apples (3.12 L water per kg fruit) is shown in Table D.3.

Calculated concentrations in fruit are rather high for the polar compounds, but probably overestimated. The model can be considered as "conservative", because loss of compound from the stem and the fruit by volatilization into air and by metabolism in the fruit is neglected.

Table D.3  
Calculated bioconcentration in fruits (mg/kg fresh fruits : mg/kg wet soil). 2% organic carbon in soil

Compound	Apple	Hazelnut
Naphthalene	0.05	0.36
Benzo(a)pyrene	$7.14 \cdot 10^{-8}$	$4.71 \cdot 10^{-7}$
MTBE	2.80	18.5
Toluene	0.34	2.23
n-Dodecane	$5.07 \cdot 10^{-7}$	$3.35 \cdot 10^{-6}$
Trichloroethene	0.16	1.03
Benzene	1.24	8.19
Tetrachloroethene	0.25	1.62



## Direct soil contact

Given that the amount of attached soil to the plant is  $w_s$  (kg wet weight), and that the weight of the plant is  $w_p$  (kg wet weight).

The net transfer rate (TFnet) is defined as the relative contribution from the attached soil to the total concentration in plant. It can be calculated from

$$\text{TFnet} = f_{\text{efficiency}} \cdot w_s / w_p \quad \text{Equation 25}$$

where

$f_{\text{efficiency}}$  is the fraction of the chemical in the attached soil particles actually entering the plant

$C_B$  is the chemical concentration in bulk wet soil.

This means that the concentration in washed plant ( $C_p$ ) is calculated from

$$C_p = \text{TFnet} \cdot C_B + C_{p,0} \quad \text{Equation 26}$$

where

$C_p$  is the concentration of a chemical in plant

$C_{p,0}$  is the background concentration, i.e. the concentration in the plant if no soil attachment occurs

Let  $R$  be the ratio of attached soil to the total plant weight (inclusive soil):

$$R = w_s / (w_s + w_p) \quad \text{Equation 27}$$

giving

$$\text{TFnet} = R / (1 - R) \cdot f_{\text{efficiency}} \quad \text{Equation 28}$$

Once deposited on a leaf, the chemical may undergo several fate processes:

- It may volatilize
- It may be washed off together with the particle
- It may be degraded
- It may migrate into the leaf

Particles deposited to leaves seem to migrate partly into the cuticle. A significant fraction may remain in foliage even after intense washing (Kaupp 1996). The net transfer factor for a washed plant that has taken up *all* chemical from the attached soil ( $f_{\text{efficiency}} = 1$ ) is

$$\text{TFnet} = \frac{R}{1 - R} \quad \text{Equation 29}$$

For  $R \ll 1$  it follows that  $TF_{net} \approx R$ , meaning that the contribution from the attachment of soil particles to the soil BCF for the plant (concentration in plant divided by the concentration in bulk wet soil), can be calculated from relative mass loading (mass of soil per mass of plant) on the plant.

Table E.1  
Empirical values for mass loadings of soil particles on plants (g soil per g plant dry weight)

Plant	Mass loading	Reference
Pasture grass < 25 cm height	0.0045	Pinder III et al. (1991)
Pasture grass > 25 cm height	0.00024	Pinder III et al. (1991)
Broccoli	0.01	Pinder III & McLeod (1989)
Cabbage	0.0011	"
Lettuce	0.260	"
Sunflowers	0.0026	"
Tobacco	0.0021	"
Turnips	0.032	"
Grass	0.018	Li et al. (1994)
Tomatoes	0.017	"
Soybean	0.0021	"
Wheat	0.0048	"
Corn	0.0014	"
Broadbean	0.0095	"
Ryegrass	0.0058	"
MEAN	0.025	

Table E.1 gives an overview of empirical values of soil mass loadings on plants. The highest loading has lettuce, with 0.26 g soil attached to 1 g lettuce (dry weight). The mean of all values is 0.025 g soil per g dry plant. For a dry weight of 20%, this corresponds to 0.005 g soil per g fresh plant. The default value in the ECOSYS model for nuclear risk assessment is 1% for grass (Paretzke & Garland). The default value of CSOIL is 1% on a dry weight basis, corresponding to 0.1% on a fresh weight basis (Johannes Lijzen, personal communication 2002). RIVM uses 9.8 % average plant dry weight.

# Soil-Air-Plant transport model SAP

Besides the simple assumption of chemical equilibrium between chemical concentration in soil, lower atmosphere, and plant, only one modelling attempt has been made to develop a model for diffusive transport of compounds in the vapour phase from soil to atmosphere (Trapp & Matthies 1997). The model calculates volatilization from soil by a solution of the diffusion equation for two neighbouring media with different properties. Within soil and vegetation layer, immediate equilibrium between gas phase and soil matrix or plant material is assumed, and an effective diffusion coefficient is calculated.

The mathematical solution is based on the following rigid boundary conditions:

*Soil* ( $z < 0$ )

$C$  = total concentration in bulk soil =  $C_B$

$D$  = effective gaseous diffusion coefficient of the gaseous fraction in soil =

$D_{A,eff} \cdot f_A = D_B$

Initial condition: semi-infinite contaminated soil,  $C_B(t=0, z < 0) = \text{constant} = C_B(0)$

*Vegetation* ( $z > 0$ )

$C$  = concentration in vegetation layer =  $C_V$

$D$  = diffusion coefficient in the vegetation layer:  $D = D_V$

initially clean vegetation:  $C_V(t=0, z > 0) = \text{constant} = 0$

At the soil surface ( $z=0$ ), the concentration is in local equilibrium, described by the partition coefficient  $K$ :

$$K = K_{VR} = C_V(z=0)/C_B(z=0) \quad \text{Equation 30}$$

At the boundary, the flux out of the soil is equal to the flux into the vegetation (and vice versa):

$$D_B \cdot \frac{\partial C_B}{\partial z} = D_V \cdot \frac{\partial C_V}{\partial z} \quad (z=0) \quad \text{Equation 31}$$

For this problem, Jost found already in 1937 a standard solution:

$$C_B(z,t) = \frac{C_B(0)}{1+K \cdot \sqrt{\frac{D_V}{D_B}}} \cdot \left(1 + K \cdot \sqrt{\frac{D_V}{D_B}} \cdot \text{erf} \frac{-z}{2 \cdot \sqrt{D_B \cdot t}}\right) \quad \text{Equation 32}$$

and

$$C_V(z,t) = \frac{K \cdot C_B(0)}{1 + K \cdot \sqrt{\frac{D_V}{D_B}}} \cdot \operatorname{erf} \frac{-z}{2 \cdot \sqrt{D_V \cdot t}} \quad \text{Equation 33}$$

A few cms above the soil surface, dispersion dominates over diffusion, and turbulence leads to a quick mixing with the lower atmosphere (Nobel 1991). To account for this effect, the concentration in the plant due to volatilization from zero cm to growth height can be integrated. Concentrations in plant parts >5 cm, where the air is turbulently mixed, are better calculated from equilibrium to the lower atmosphere (see Figure F.1).

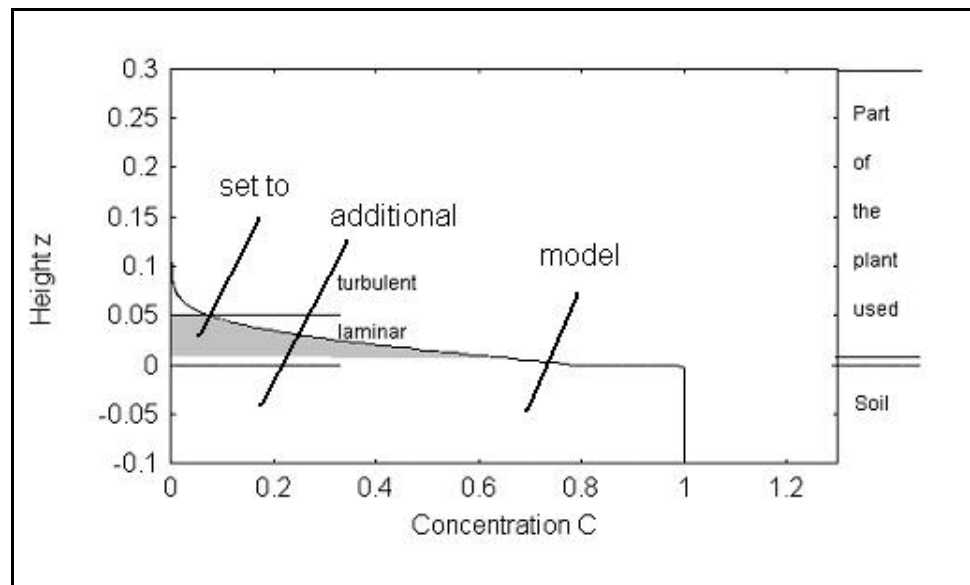


Figure F.1  
Calculation of chemical mass transfer in gas phase transport with the soil-air-plant model, where  $C$  = the concentration in soil or vegetation minus equilibrium concentration to air.

The approach has been used and tested by Thomas *et al.* (1998) to calculate the air-pasture transfer of polychlorinated biphenyls. The authors compared measured and modelled concentrations for different heights. Best agreement was found when the simulated concentration was averaged for the plant from soil surface to 5 cm height. For the PCB congener 52, 1.2 pg/g grass were predicted, but 44 pg/g were measured. For PCB 153, 55 pg/g were predicted, and 66 pg/g measured. For PCB 180, 26 pg/g were predicted, but 40 pg/g were measured. The authors concluded that the model assumptions are unrealistic. But the strict initial and boundary conditions are necessary to obtain the mathematical solution.



## Jury-Model for Transport in Soil

The following 2<sup>nd</sup> order differentialequation describes the transport of substances in the soil, accounting for both the diffusion in the air and water phases and the advection. Both the effectiv diffusioncoefficient ( $D_E$ ) and the advective flow velocity ( $V_E$ ) are assumed to be constant:

$$\frac{\partial C_T}{\partial t} + \mu \cdot C_T = D_E \cdot z^2 \cdot \frac{\partial^2 C_T}{\partial z^2} - V_E \cdot \frac{\partial C_T}{\partial z} \quad \text{Equation 34}$$

where

$C_T$  is the total concentration in soil (mg/kg)

$\mu$  is the degradation rate constant for the degradation in soil ( $d^{-1}$ ).

$D_E$  is the effective diffusioncoefficient in soil ( $m^2/d$ ), accounting for both the diffusion in the soil pore water and pore air.

$V_E$  is the advective flow velocity of water in the soil (m/d)

The solution of Jury *et al.* is used (1983, beware! there is an error in equation 24 in this paper, see erratum 1987). This solution includes diffusion in the gas and water phase, advection of water, degradation of the compound and an unpolluted layer on top of the polluted soil layer. As upper boundary condition, concentration at the soil surface is zero. The sensitivity of this model has been studied by Anderson & Parker (1990). The model has already been used in risk assessment by Sanders & Stern (1994). For the simulation of a layer of uncontaminated soil on a layer of contaminated soil (or groundwater), a suitable solution is found in Jury *et al.* (1990), eqs. 17-21. Of the three times, the equation was typesetted in journals, only one version (erratum 1987) is correct! We therefore use a hand-corrected scan of the solution (from Jury *et al.* 1990):

The concentration in calculated from:

Jury *et al.* [1983] solved (10) with the upper boundary condition (13) for the case of a chemical initially incorporated to depth  $L$  at a uniform concentration  $C_o$

$$\begin{aligned} C_T(z, 0) &= C_o & 0 < z < L \\ C_T(z, 0) &= 0 & z > L \end{aligned} \quad (15)$$

and the lower boundary condition

$$C_T(\infty, t) = 0 \quad (16)$$

The solutions for the concentration and the flux at the soil surface [Jury *et al.*, 1983, equations 24 and 25] are

$$\begin{aligned} C_T(z, t; L) &= \frac{1}{2} C_o \exp(-\mu t) \left\{ \operatorname{erfc} \left[ \frac{(z - L - V_E t)}{(4D_E t)^{1/2}} \right] \right. \\ &\quad - \operatorname{erfc} \left[ \frac{(z - V_E t)}{(4D_E t)^{1/2}} \right] + (1 + V_E/H_E) \\ &\quad \cdot \exp(V_E z/D_E) \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{(z + L + V_E t)}{(4D_E t)^{1/2}} \right) \right. \\ &\quad \left. - \operatorname{erfc} \left( \frac{(z + V_E t)}{(4D_E t)^{1/2}} \right) \right] + (2 + V_E/H_E) \\ &\quad \cdot \exp\{[H_E(H_E + V_E)t + (H_E + V_E)z]/D_E\} \\ &\quad \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{[z + (2H_E + V_E)t]}{(4D_E t)^{1/2}} \right) \right. \\ &\quad \left. \left. - \exp(H_E L/D_E) \operatorname{erfc} \left( \frac{[z + L + (2H_E + V_E)t]}{(4D_E t)^{1/2}} \right) \right] \right\} \quad (17) \end{aligned}$$

Equation 35

$$\begin{aligned} J_s(0, t; L) &= \frac{1}{2} C_o \exp(-\mu t) \left\{ V_E \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{V_E t}{(4D_E t)^{1/2}} \right) \right. \right. \\ &\quad \left. - \operatorname{erfc} \left( \frac{(L + V_E t)}{(4D_E t)^{1/2}} \right) \right] + (2H_E + V_E) \\ &\quad \cdot \exp[H_E(H_E + V_E)t/D_E] \left[ \exp(H_E L/D_E) \right. \\ &\quad \cdot \operatorname{erfc} \left( \frac{[L + (2H_E + V_E)t]}{(4D_E t)^{1/2}} \right) \\ &\quad \left. \left. - \operatorname{erfc} \left( \frac{[(2H_E + V_E)t]}{(4D_E t)^{1/2}} \right) \right] \right\} \quad (18) \end{aligned}$$

Equation 36

For the initial and boundary conditions

$$\begin{aligned}
C_T(z, 0) &= 0 & 0 < z < L \\
C_T(z, 0) &= C_o & L < z < L + W \\
C_T(z, 0) &= 0 & z > L + W
\end{aligned} \tag{19} \quad \text{Equation 37}$$

the solution is found by superposition:

This solution is given by

$$C_T^b(z, t) = C_T(z, t; L + W) - C_T(z, t; L) \tag{20} \quad \text{Equation 38}$$

$$J_s^b(o, t) = J_s(o, t; L + W) - J_s(o, t; L) \tag{21}$$

where

- z is the depth below soil (negative)
- t is the time
- $C_T(z, t)$  is the total concentration in the soil at depth z and time t
- $J_s(o, t)$  is the volatilization flux at the soil surface and time t
- L is depth of the coverage layer
- W is the depth of the polluted layer
- $\mu$  is the 1<sup>st</sup> order degradation rate constant in soil
- $H_E$  is calculated from

$$H_E = \frac{D_{A, \text{Luft}}}{\delta_{\text{Luft}}} \cdot \frac{K_{AW}}{K_D \cdot ? + P_W + P_A \cdot K_{AW}} \tag{Equation 39}$$

- $D_{A, \text{Luft}}$  is the effective diffusion coefficient in the air
- $\delta_{\text{Luft}}$  is thickness of the stagnant layer
- $V_E$  is calculated from

$$V_E = \frac{J_W}{K_D \cdot ? + P_W + P_A \cdot K_{AW}} \tag{Equation 40}$$

- $J_W$  is the volumetric soil water flux (m/d)

### Example

Figure G.1 shows the result of a simulation for naphthalene with an initially contaminated layer between -0.5 and -3 m depth, and a non-contaminated soil above. The averaged concentration after 10 years in the originally unpolluted layer between 0 and -50 cm is 12.38% of the initially polluted layer.

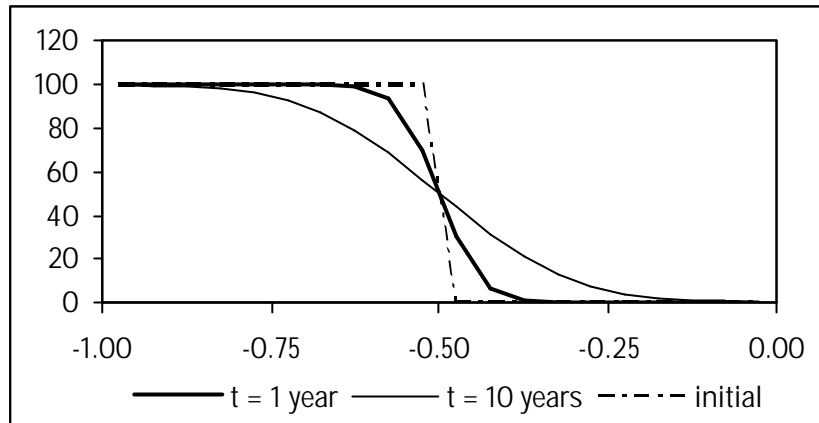


Figure G.1  
 Simulated migration of Naphthalene from a polluted soil layer into a unpolluted cover of thickness 50 cm (Soil 1).

Persistent volatile chemicals migrate with time into the uncontaminated layer. To consider this in plant uptake modelling, the average concentration in the root zone is calculated with the Jury model, and used as *factor*. The soil concentration relevant for the plant is then the concentration of the chemical in the contaminant layer times the migration factor.

Table G.1  
 Factors for migration of compounds into uncontaminated soil (ratio between average concentration in upper layer and the concentration in the initial polluted layer). Root zone thickness here set to 0.5 m.

Compound	Soil 1 0-50 cm 1 year	Soil 1 0-50 cm 10 years	Soil 2 0-50 cm 1 year	Soil 2 0-50 cm 10years
Naphthalene	0.039	0.124	0.218	0.053
Benzo(a)pyrene	0.000	0.000	0.000	0.003
MTBE	0.219	0.174	0.057	0.003
Toluene	0.223	0.169	0.011	0.000
n-Dodecane	0.230	0.069	0.002	0.000
Trichloroethene	0.208	0.186	0.014	0.001
Benzene	0.233	0.076	0.004	0.000
Tetrachlorethene	0.242	0.104	0.005	0.000

All chemicals have –except benzo(a)pyrene - the potential to migrate from a deeper polluted layer into a overlying non-polluted layer. The results in Table G.1 show that the average concentration in the root zone is about a factor 5 below that of the initially polluted layer after 1 year. The volatile chemicals, MTBE, toluene, trichloroethene, benzene, tetrachloroethene and *n*-dodecane, reach their maximum in soil 2 before the first year, and the upper part of the polluted layer depletes quickly. Toluene is known to be degraded quickly in aerobic soils (Rippen 2002), therefore, the value is an upper estimate.

## Sammenligning med markforsøg

Tabel H.1  
Sammenligning af målte og beregnede BCF-værdier (våd vægt) af stoffer i rodafgrøder og kartofler

Afgrøde	Stof	Målte værdier	Std.afv.	n	TGD	Travis & Arms	Gulerods-model	Kartoffel-model	Ligevægt
Gulerod m. skræl	Acenaphthylen <sup>3a)</sup>	$1,31 \cdot 10^{-2}$	$2,62 \cdot 10^{-2}$	5	0,28	$2,2 \cdot 10^{-2}$	$1,1 \cdot 10^{-1}$	$8,1 \cdot 10^{-2}$	0,12
Kartoffel m. skræl	Acenaphthylen <sup>3a)</sup>			0	0,28	$4,1 \cdot 10^{-2}$		$4,6 \cdot 10^{-2}$	0,10
Gulerod m. skræl	Acenaphthylen <sup>3b)</sup>	$5,39 \cdot 10^{-4}$	$5,22 \cdot 10^{-4}$	5	0,07	$2,2 \cdot 10^{-2}$	$2,6 \cdot 10^{-2}$	$1,9 \cdot 10^{-2}$	0,03
Kartoffel m. skræl	Acenaphthylen <sup>3b)</sup>			0	0,07	$4,1 \cdot 10^{-2}$		$1,1 \cdot 10^{-2}$	0,02
Gulerod m. skræl	Acenaphthylen <sup>3c)</sup>	$2,56 \cdot 10^{-2}$	$2,34 \cdot 10^{-2}$	4	0,50	$2,2 \cdot 10^{-2}$	$2,0 \cdot 10^{-1}$	$1,4 \cdot 10^{-1}$	0,21
Kartoffel m. skræl	Acenaphthylen <sup>3c)</sup>				0,50	$4,1 \cdot 10^{-2}$		$8,0 \cdot 10^{-2}$	0,17
Gulerod	Benzo(a)pyren <sup>1)</sup>	$3,2 \cdot 10^{-3}$		3	0,30	$1,2 \cdot 10^{-3}$	$4,0 \cdot 10^{-2}$	$5,5 \cdot 10^{-3}$	0,11
Løg	Benzo(a)pyren <sup>1)</sup>	$2,4 \cdot 10^{-4}$		2	0,30	$2,2 \cdot 10^{-3}$			
Radise	Benzo(a)pyren <sup>1)</sup>	$1,5 \cdot 10^{-3}$		1	0,30	$4,5 \cdot 10^{-4}$	$1,9 \cdot 10^{-2}$	$3,4 \cdot 10^{-3}$	0,03
Roe	Benzo(a)pyren <sup>1)</sup>	$1,9 \cdot 10^{-3}$		2	0,30	$8,9 \cdot 10^{-4}$	$1,9 \cdot 10^{-2}$	$1,5 \cdot 10^{-3}$	0,03
Gulerod**	Benzo(a)pyren <sup>2)</sup>	$1,0 \cdot 10^{-4}$		18	0,30	$1,2 \cdot 10^{-3}$	$4,0 \cdot 10^{-2}$	$5,5 \cdot 10^{-3}$	0,11
Kartoffel**	Benzo(a)pyren <sup>2)</sup>	0*		18	0,30	$2,2 \cdot 10^{-3}$		$1,8 \cdot 10^{-3}$	0,08
Radise	Benzo(a)pyren	$6,5 \cdot 10^{-4}$		16	0,30	$4,5 \cdot 10^{-4}$	$1,9 \cdot 10^{-2}$	$3,4 \cdot 10^{-3}$	0,03
Gulerod m. skræl	Benzo(a)pyren <sup>3a)</sup>	$6,46 \cdot 10^{-3}$	$1,31 \cdot 10^{-2}$	5	0,22	$1,2 \cdot 10^{-3}$	$2,9 \cdot 10^{-2}$	$4,0 \cdot 10^{-3}$	0,08
Kartoffel m. skræl	Benzo(a)pyren <sup>3a)</sup>	$8,99 \cdot 10^{-4}$	$1,25 \cdot 10^{-3}$	6	0,22	$2,2 \cdot 10^{-3}$		$1,3 \cdot 10^{-3}$	0,06
Gulerod m. skræl	Benzo(a)pyren <sup>3b)</sup>	$2,30 \cdot 10^{-4}$	$1,72 \cdot 10^{-4}$	5	0,05	$1,2 \cdot 10^{-3}$	$6,7 \cdot 10^{-3}$	$9,1 \cdot 10^{-4}$	0,02
Kartoffel m. skræl	Benzo(a)pyren <sup>3b)</sup>	$2,34 \cdot 10^{-4}$	$2,51 \cdot 10^{-4}$	5	0,05	$2,2 \cdot 10^{-3}$		$3,1 \cdot 10^{-4}$	0,01
Gulerod m. skræl	Benzo(a)pyren <sup>3c)</sup>	$6,25 \cdot 10^{-4}$		1	0,39	$1,2 \cdot 10^{-3}$	$5,1 \cdot 10^{-2}$	$7,0 \cdot 10^{-3}$	0,14
Kartoffel m. skræl	Benzo(a)pyren <sup>3c)</sup>				0,39	$2,2 \cdot 10^{-3}$		$2,3 \cdot 10^{-3}$	0,11
Gulerod m. skræl	Benzo(b+j+k)fluoranthen <sup>3a)</sup>	$6,62 \cdot 10^{-3}$	$1,34 \cdot 10^{-2}$	5	0,22	$1,5 \cdot 10^{-3}$	$3,6 \cdot 10^{-2}$	$5,2 \cdot 10^{-3}$	0,08
Kartoffel m. skræl	Benzo(b+j+k)fluoranthen <sup>3a)</sup>	$7,27 \cdot 10^{-4}$	$9,42 \cdot 10^{-4}$	6	0,22	$2,9 \cdot 10^{-3}$		$1,9 \cdot 10^{-3}$	0,06
Gulerod m. skræl	Benzo(b+j+k)fluoranthen <sup>3b)</sup>	$1,85 \cdot 10^{-4}$	$1,38 \cdot 10^{-4}$	5	0,05	$1,5 \cdot 10^{-3}$	$8,3 \cdot 10^{-3}$	$1,2 \cdot 10^{-3}$	0,02
Kartoffel m. skræl	Benzo(b+j+k)fluoranthen <sup>3b)</sup>	$2,51 \cdot 10^{-4}$	$2,41 \cdot 10^{-4}$	5	0,05	$2,9 \cdot 10^{-3}$		$4,3 \cdot 10^{-4}$	0,01

Afgrøde	Stof	Målte værdier	Std.afv.	n	TGD	Travis & Arms	Gulerods-model	Kartoffel-model	Ligevægt
Gulerod m. skræl	Benzo(b+j+k)fluoranthen <sup>3c)</sup>	$8,14 \cdot 10^{-4}$		1	0,39	$1,5 \cdot 10^{-3}$	$6,3 \cdot 10^{-2}$	$9,1 \cdot 10^{-3}$	0,14
Kartoffel m. skræl	Benzo(b+j+k)fluoranthen <sup>3c)</sup>	$1,61 \cdot 10^{-3}$	$2,38 \cdot 10^{-4}$	5	0,39	$2,9 \cdot 10^{-3}$		$3,3 \cdot 10^{-3}$	0,11
Gulerod m. skræl	Fluoranthen <sup>3a)</sup>	$1,49 \cdot 10^{-2}$	$3,05 \cdot 10^{-2}$	5	0,24	$4,3 \cdot 10^{-3}$	$6,6 \cdot 10^{-2}$	$1,7 \cdot 10^{-2}$	0,09
Kartoffel m. skræl	Fluoranthen <sup>3a)</sup>	$1,53 \cdot 10^{-3}$	$1,65 \cdot 10^{-3}$	6	0,24	$8,1 \cdot 10^{-3}$		$7,1 \cdot 10^{-3}$	0,07
Gulerod m. skræl	Fluoranthen <sup>3b)</sup>	$3,94 \cdot 10^{-4}$	$2,39 \cdot 10^{-4}$	5	0,06	$4,3 \cdot 10^{-3}$	$1,5 \cdot 10^{-2}$	$3,8 \cdot 10^{-3}$	0,02
Kartoffel m. skræl	Fluoranthen <sup>3b)</sup>	$3,30 \cdot 10^{-4}$	$2,93 \cdot 10^{-4}$	5	0,06	$8,1 \cdot 10^{-3}$		$1,6 \cdot 10^{-3}$	0,02
Gulerod m. skræl	Fluoranthen <sup>3c)</sup>	$2,08 \cdot 10^{-3}$	$2,03 \cdot 10^{-3}$	4	0,43	$4,3 \cdot 10^{-3}$	$1,2 \cdot 10^{-1}$	$2,9 \cdot 10^{-2}$	0,16
Kartoffel m. skræl	Fluoranthen <sup>3c)</sup>	$1,87 \cdot 10^{-2}$	$4,67 \cdot 10^{-3}$	5	0,43	$8,1 \cdot 10^{-3}$		$1,3 \cdot 10^{-2}$	0,12
Gulerod m. skræl	Indeno(1,2,3-cd)pyren <sup>3a)</sup>	$6,79 \cdot 10^{-3}$	$1,35 \cdot 10^{-2}$	5	0,21	$7,2 \cdot 10^{-4}$	$1,8 \cdot 10^{-2}$	$2,1 \cdot 10^{-3}$	0,08
Kartoffel m. skræl	Indeno(1,2,3-cd)pyren <sup>3a)</sup>	$9,47 \cdot 10^{-4}$	$7,33 \cdot 10^{-4}$	6	0,21	$1,4 \cdot 10^{-3}$		$5,1 \cdot 10^{-4}$	0,06
Gulerod m. skræl	Indeno(1,2,3-cd)pyren <sup>3b)</sup>	$2,63 \cdot 10^{-4}$	$1,68 \cdot 10^{-4}$	5	0,05	$7,2 \cdot 10^{-4}$	$4,0 \cdot 10^{-3}$	$4,8 \cdot 10^{-4}$	0,02
Kartoffel m. skræl	Indeno(1,2,3-cd)pyren <sup>3b)</sup>	$3,19 \cdot 10^{-4}$	$2,72 \cdot 10^{-4}$	5	0,05	$1,4 \cdot 10^{-3}$		$1,2 \cdot 10^{-4}$	0,01
Gulerod m. skræl	Indeno(1,2,3-cd)pyren <sup>3c)</sup>			0	0,37	$7,2 \cdot 10^{-4}$	$3,1 \cdot 10^{-2}$	$3,6 \cdot 10^{-3}$	0,14
Kartoffel m. skræl	Indeno(1,2,3-cd)pyren <sup>3c)</sup>				0,37	$1,4 \cdot 10^{-3}$		$9,1 \cdot 10^{-4}$	0,10
Gulerod	Naphthalen <sup>2)</sup>	$1,0 \cdot 10^{-4}$			0,45	$4,7 \cdot 10^{-2}$	$1,5 \cdot 10^{-1}$	$2,1 \cdot 10^{-1}$	0,22
Kartoffel	Naphthalen <sup>2)</sup>	0 *			0,45	$8,9 \cdot 10^{-2}$		$1,4 \cdot 10^{-1}$	0,19
Radise	Naphthalen <sup>2)</sup>	$8,8 \cdot 10^{-4}$			0,45	$1,8 \cdot 10^{-2}$	$3,9 \cdot 10^{-2}$	$1,0 \cdot 10^{-1}$	0,10

<sup>1)</sup> Knoche et al. (1995)

<sup>2)</sup> Delschen et al. (1996).

<sup>3)</sup> Samsøe-Petersen et al. (2001). a) Comet soil; b) Valby soil; c) reference soil

\* no significant difference to controls

\*\* kitchen ready: washed and peeled

Tabel H.2  
Sammenligning af målte og beregnede BCF-værdier (våd vægt) af stoffer i  
bladafgrøder

Afgrøde	Stof	Målt= beregnet	TGD	Travis & Arms	SOIL	SAP	TGD + soil	SAP + soil
Frisk spinat <sup>1)</sup>	Benzo(a)pyren	5,6·10 <sup>-4</sup>	5,0·10 <sup>-9</sup>	9,1·10 <sup>-4</sup>	2,1·10 <sup>-2</sup>	8,2·10 <sup>-7</sup>	2,1·10 <sup>-2</sup>	2,1·10 <sup>-2</sup>
Spinat <sup>1)</sup>	Benzo(a)pyren	3,0·10 <sup>-3</sup>	5,0·10 <sup>-9</sup>	9,1·10 <sup>-4</sup>	2,1·10 <sup>-2</sup>	8,2·10 <sup>-7</sup>	2,1·10 <sup>-2</sup>	2,1·10 <sup>-2</sup>
Salat (Lollo Rosso) <sup>1)</sup>	Benzo(a)pyren	1,2·10 <sup>-3</sup>	3,1·10 <sup>-9</sup>	7,2·10 <sup>-4</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>	2,4·10 <sup>-4</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>
Julesalat <sup>2)</sup>	Benzo(a)pyren	8,0·10 <sup>-4</sup>	8,3·10 <sup>-9</sup>	6,1·10 <sup>-4</sup>	1,4·10 <sup>-2</sup>	5,6·10 <sup>-4</sup>	1,4·10 <sup>-2</sup>	1,5·10 <sup>-2</sup>
Savoykål <sup>1)</sup>	Benzo(a)pyren	0,0	8,3·10 <sup>-9</sup>	1,0·10 <sup>-3</sup>	2,3·10 <sup>-2</sup>	2,7·10 <sup>-3</sup>	2,3·10 <sup>-2</sup>	2,6·10 <sup>-2</sup>
Frisk salat (Lollo Rosso) <sup>1)</sup>	Benzo(a)pyren	8,0·10 <sup>-4</sup>	3,1·10 <sup>-9</sup>	7,2·10 <sup>-4</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>	2,4·10 <sup>-4</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>
Grønkål <sup>1)</sup>	Benzo(a)pyren	0,0	7,4·10 <sup>-9</sup>	2,0·10 <sup>-3</sup>	4,7·10 <sup>-2</sup>	7,7·10 <sup>-5</sup>	4,7·10 <sup>-2</sup>	4,7·10 <sup>-2</sup>
Zucchini <sup>1)</sup>	Benzo(a)pyren	2,9·10 <sup>-5</sup>						
Porre <sup>1)</sup>	Benzo(a)pyren	6,2E+05						
Frisk spinat <sup>1)</sup>	Naphthalen	7,9·10 <sup>-4</sup>	2,7·10 <sup>-1</sup>	3,6·10 <sup>-2</sup>	2,1·10 <sup>-2</sup>	3,0·10 <sup>-1</sup>	2,9·10 <sup>-1</sup>	3,2·10 <sup>-1</sup>
Spinat <sup>1)</sup>	Naphthalen	9,4·10 <sup>-6</sup>	2,7·10 <sup>-1</sup>	3,6·10 <sup>-2</sup>	2,1·10 <sup>-2</sup>	3,0·10 <sup>-1</sup>	2,9·10 <sup>-1</sup>	3,2·10 <sup>-1</sup>
Hvedekerne <sup>1)</sup>	Naphthalen	2,1·10 <sup>-3</sup>						
Hvedestrå <sup>1)</sup>	Naphthalen	4,3·10 <sup>-3</sup>						
Salat <sup>1)</sup>	Naphthalen	1,1·10 <sup>-4</sup>	1,8·10 <sup>-1</sup>	2,9·10 <sup>-2</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>	2,5·10 <sup>-1</sup>	2,0·10 <sup>-1</sup>	2,6·10 <sup>-1</sup>
Frisk salat <sup>1)</sup>	Naphthalen	3,0·10 <sup>-4</sup>	1,8·10 <sup>-1</sup>	2,9·10 <sup>-2</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>	2,5·10 <sup>-1</sup>	2,0·10 <sup>-1</sup>	2,6·10 <sup>-1</sup>
Julesalat <sup>1)</sup>	Naphthalen	7,0·10 <sup>-4</sup>	1,2·10 <sup>-3</sup>	2,4·10 <sup>-2</sup>	1,4·10 <sup>-2</sup>	1,6·10 <sup>-1</sup>	1,6·10 <sup>-2</sup>	1,8·10 <sup>-1</sup>
Porre <sup>1)</sup>	Naphthalen							
Savoykål <sup>1)</sup>	Naphthalen		1,2·10 <sup>-3</sup>	4,0·10 <sup>-2</sup>	2,3·10 <sup>-2</sup>	1,1·10 <sup>-1</sup>	2,5·10 <sup>-2</sup>	1,4·10 <sup>-1</sup>
Zucchini <sup>1)</sup>	Naphthalen	1,1·10 <sup>-5</sup>						
Salat <sup>2a)</sup>	Acenaphthylen		5,9·10 <sup>-8</sup>	1,3·10 <sup>-2</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>	2,3·10 <sup>-1</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>	2,4·10 <sup>-1</sup>
Salat <sup>2a)</sup>	Fluoranthen	1,0·10 <sup>-4</sup>	7,6·10 <sup>-8</sup>	2,7·10 <sup>-3</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>	1,5·10 <sup>-1</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>	1,7·10 <sup>-1</sup>
Salat <sup>2a)</sup>	Benzo(b+j+k)- fluoranthen	1,6·10 <sup>-4</sup>	5,8·10 <sup>-9</sup>	9,2·10 <sup>-4</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>	5,3·10 <sup>-3</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>	2,2·10 <sup>-2</sup>
Salat <sup>2a)</sup>	Benzo(a)-pyren	7,2·10 <sup>-5</sup>	2,2·10 <sup>-9</sup>	7,2·10 <sup>-4</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>	2,0·10 <sup>-4</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>
Salat <sup>2b)</sup>	Indeno(1,2,3- cd)-pyren		6,6E-11	4,4·10 <sup>-4</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>		1,7·10 <sup>-2</sup>	
Salat <sup>2b)</sup>	Acenaphthylen		1,4·10 <sup>-8</sup>	1,3·10 <sup>-2</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>	1,1·10 <sup>-1</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>	1,3·10 <sup>-1</sup>
Salat <sup>2b)</sup>	Fluoranthen	5,2·10 <sup>-5</sup>	1,8·10 <sup>-8</sup>	2,7·10 <sup>-3</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>	7,4·10 <sup>-2</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>	9,1·10 <sup>-2</sup>
Salat <sup>2b)</sup>	Benzo(b+j+k)- fluoranthen	1,8·10 <sup>-5</sup>	1,3·10 <sup>-9</sup>	9,2·10 <sup>-4</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>	2,6·10 <sup>-3</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>	1,9·10 <sup>-2</sup>
Salat <sup>2b)</sup>	Benzo(a)pyren	3,2·10 <sup>-5</sup>	5,1E-10	7,2·10 <sup>-4</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>	9,6·10 <sup>-5</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>
Salat <sup>2b)</sup>	Indeno(1,2,3- cd)-pyren		6,6E-11	4,4·10 <sup>-4</sup>	1,7·10 <sup>-2</sup>		1,7·10 <sup>-2</sup>	

<sup>1)</sup> Delschen et al. (1996).

<sup>2)</sup> Samsøe-Petersen et al. (2001). a) Comet soil; b) Valby soil



# Planteparametre

Tabel I.1  
Anvendte frugtdata. i.r.: Ikke relevant

Afgrøde	Jordstænk (g tør jord/ tør afgrøde)	Transpirations- hastighed L/kg/d	Stængel vækst- hastigheds- konstant (d-1)	Vand- indhold kg/kg	Vandflow (L/kg)	Rod- dybde (m)	VpVv	Vækst- højde
Jordbær	0,02	2	0,035	0,896	2,08	0,5	0,0067	0,1
Æble	0	0,082	$2,74 \cdot 10^{-5}$	0,857	2,86	2,0	0,0067	i.r.
Pære	0	0,082	$2,74 \cdot 10^{-5}$	0,851	2,98	2,0	0,0067	i.r.
Hyben	0	0,082	$2,74 \cdot 10^{-5}$	0,769	4,62	1,0	0,0067	i.r.
Stikkelsbær	0	0,082	$2,74 \cdot 10^{-5}$	0,879	2,42	1,0	0,0067	i.r.
Blomme	0	0,082	$2,74 \cdot 10^{-5}$	0,884	2,32	2,0	0,0067	i.r.
Valnød	0	0,082	$2,74 \cdot 10^{-5}$	0,05	19	2,0	0,0067	i.r.
Hasselnød	0	0,082	$2,74 \cdot 10^{-5}$	0,056	18,88	2,0	0,0067	i.r.

Tabel I.2  
Anvendte data for rodafgrøder - rod

Afgrøde	Vækst- længde	Lipid	Vand	Luft	Kul- hydrat	Læng- de	Dia- meter	Den- sitet	Dybde	Frugt- dybde	VpVv
	d	kg/kg	kg/kg	L/L	kg/kg	m	m	kg/L	m	m	
Gulerødder	90	0,004	0,89	0,102	0,088	0,1	0,034	1,02	1,0	0,15	0,0067
Kartofler	60	0,003	0,80	0,061	0,172	-	0,050	1,02	1,0	0,15	0,0067
Radise	30	0,001	0,96	0,102	0,025	0,054	0,020	0,92	1,0	0,3	0,0067
Majroe	65	0,001	0,92	0,100	0,067	0,055	0,055	1,02	0,3	0,1	0,0067

Tabel I.3  
Anvendte data for rodafgrøder - blad

Afgrøde	Vækst- længde	Vand- indhold	Luft- volumen	Densitet	Vækstrate	Transpi- rations- hastighed	VpVv
	d	kg/kg	L/kg	kg/L	d <sup>-1</sup>	L/kg/d	
Gulerødder	90	820	1	0,82	0,035	5	0,0067
Kartofler	60	820	1	0,82	0,035	5	0,0067
Radise	30	820	1	0,82	0,035	5	0,0067
Majroe	65	820	1	0,82	0,035	5	0,0067

Tabel 1.4  
Anvendte data for bladafgrøder

Afgrøde	Vækst- længde	Areal	Tykkelse	Lipid- indhold	Kul- hydrat- indhold	Vand- indhold	Densitet blade	Jordstænk	Transpi- rations- hastig- hed	Vækst- rate	Rod- dybde	VpVv	Vækst- højde
	d	m <sup>2</sup> per kg blad	mm	kg/kg	kg/kg	kg/kg	kg/L	(g tør jord/g tør plante)	L/kg /d	d <sup>-1</sup>	m		m
Grønkål	300	1,8	0,7	0,012	0,038	0,82	0,82	0,26	1,81	0,035	1	0,0067	0,15
Salat	60	3,2	0,2	0,004	0,034	0,94	0,82	0,26	1,27	0,0585	0,5	0,0067	0,1
Spinat	40	1	0,2	0,006	0,034	0,92	0,82	0,26	1,97	0,0572	0,5	0,0067	0,1
Julesalat	40		0,2	0,002	0,038	0,95	0,82	0,26	2	0,035	0,5	0,0067	0,1
Savoykål	40		1,2	0,001	0,061	0,91	0,82	0,26	2	0,035	1	0,0067	0,1