

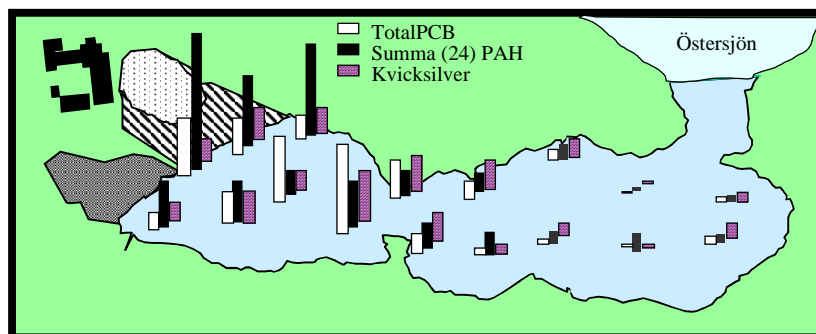


rapport

IVL Svenska Miljöinstitutet AB

Kvicksilver och organiska miljögifter i Örserumsviken

Appendix



Anna Palm, Ingvar Wängberg och Eva Brorström-Lundén
B 1433
Göteborg, oktober 2001

Appendix

Appendix 1. Provtagningsmetodik

Ur: Ramström C., Hermansson C. 2000. Program för referensundersökningar, projekt Örserumsviken 1999-2000, Västerviks kommun

Luft

PCB/PAH

Ett glasfiberfilter (Munktell MG 160) monteras i en rostfri filterhållare. Filtret fångar upp partiklar och de gasformiga föreningarna uppsamlas i två glaskolonner med polyuretanskumfyllning, PUF, som monteras i serie. Filterhållare och PUF sveps in i aluminiumfolie och monteras ca 2 meter över marknivå. Luften sugas genom filter och PUF:ar med en hastighet av 35 – 40 liter/minut med hjälp av en pump, fabrikat GAST, som kopplas till den sista PUF:en i serien med en GL 14 glashylsa och 6/4 dekoronslang. Luftmängden mäts med gasur (Gallus), som kopplas till pumpen. Provtagningen sker under ca 10 - 14 dagar varvid cirka 300-600 m³ luft sugas genom filter och PUF:ar.

Gasformigt kvicksilver

Gasformigt kvicksilver i luft provtas med guldfällor, se kammarmetoden för totalkvicksilver. Provtagningen sker ca 2 meter över markytan, med ett luftflöde på 0.2 till 0.5 liter per minut. Provtagningen sker sedan enligt kammarmetoden och pågår i 1 h.

Partikelbundet kvicksilver

Partikelbundet kvicksilver insamlas med kvartsfiberfilter. Provtagningen sker ca 2 meter över markytan. Filtrena är monterade i ett kvartsglasrör vilket förenklar provhantering och möjliggör analys via termisk avdrivning av kvicksilver utan förbehandling eller uppslutning. Provtagning görs med ett luftflöde på ca 5 liter per minut. Då partikelfällan själv stryper flödet till ca 4 – 5 liter/minut behövs ingen nålventil. En pump av fabrikat GAST och ett gasur, fabrikat Gallus, används för att suga luft genom kvartsfiberfiltret och avläsa passerad luftmängd. Alla sammankopplingar mellan partikelfällan, pump och gasur sker med 6/4 dekoronslang. Provtagningen pågår i ca 7-12 timmar och total luftvolym är 2000 – 4000 liter.

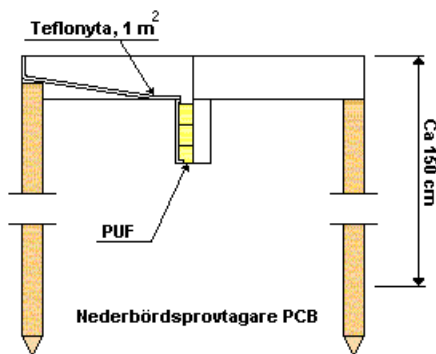
Appendix

Nederbörd

PCB / PAH

Provtagning av PCB / PAH i nederbörd sker som månadssamlingsprov. Provtagaren består av en teflonyta, 1 kvadratmeter stor, som samlar upp och leder ner nederbörden genom polyuretanadsorbent. Teflonytan står på fyra stycken ca 1,5 meter höga stolpar.

Vid provtagningens början sköljs och torkas teflonytan av med 95% EtOH och adsorbenten sätts i. Efter fjorton dagar avtorkas ytan med torkfilter av glasfiber. Filter märks och fryses in. Efter en månad torkas teflonytan noggrant av med 95% EtOH och glasfiberfilter samtidigt som adsorbenten byts. De filter som använts samt adsorbenten märks upp och fryses.

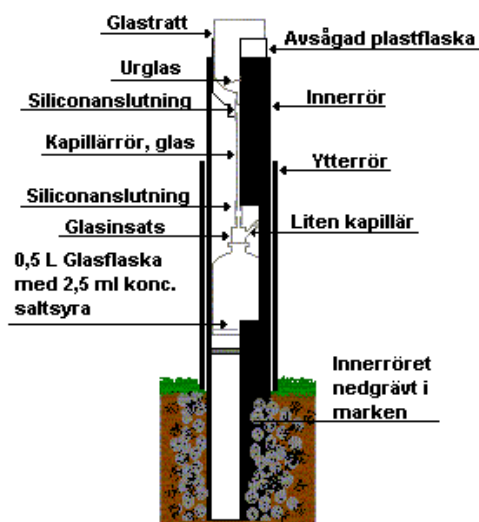


Kvicksilver

Provtagning av Hg sker som månadssamlingsprov på två stationer, med olika metoder beroende på årstid. Vinterprovtagaren består av en hink, i vilken dubbla 5 l plastpåsar monteras. Hinken sätts fast med hjälp av en hållare på en ca 1,5 meter hög stolpe och nederbörden samlas i plastpåsar i hinken. Efter en månad tas plastpåsar ur hinken, påsar knyts igen och ett hörn klipps av på påsar. 125 ml vatten hälls försiktigt över på en syradiskad teflonflaska, som skickas till analys.

Sommarprovtagaren skyddas av ett grovt rör i svart plast. Röret grävs ner i marken till ca 0,5 meters djup. Inuti röret placeras provtagaren, bestående av en glastratt med skyddande urglas över och ett glaskapillärrör ner till en 500 ml glasflaska med en konserveringsvätska av 2,5 ml koncentrerad saltsyra. Efter en månads provtagning byts flaskan. Efter sköljning av glasvarorna med MQ-vatten monteras en ny glasflaska. Rena plasthandskar används vid all provhantering. Proverna förvaras mörkt och kallt i kylskåp.

Appendix



Provtagare för Hg i nederbörd

Vatten

Vattenprover hämtas med hjälp av en 12 volts dränkbar pump (AWIMEX, Amazon 15 S) försedd med en mjuk silikon slang och fördelas i respektive provkärl. Provslang och pump sköljs efter varje provtagningsomgång med ca 30-50 l kranvatten. Pump och slang får därefter självtorka.

PCB/PAH

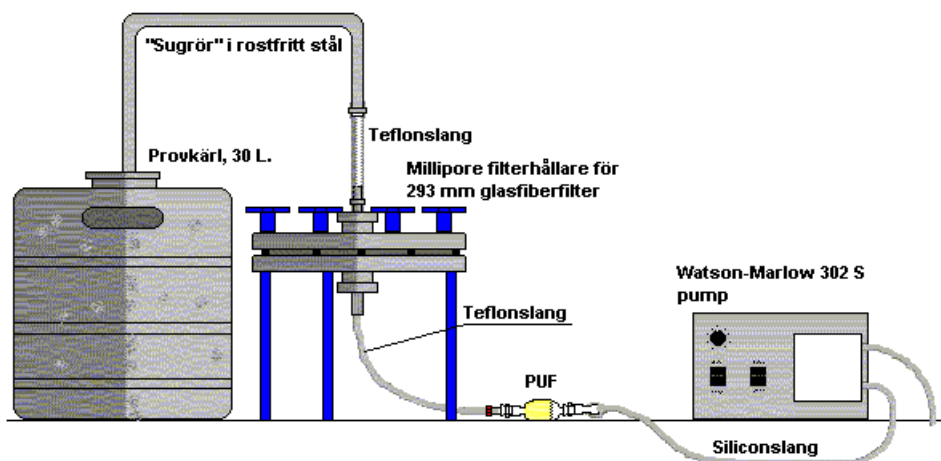
Prov för analys av PCB och PAH samlas i rostfria 30 l kärl (modell ölfat). Efter varje avslutad provtagningsomgång sköljs faten först med kranvatten och därefter med 0,5 liter 95 % etanol som töms ut. Därefter slås ca 0,5 liter etanol i varje fat, faten tillsluts och spriten hälls ut först vid nästkommande provtagningsomgång. Efter vattenprovtagningen filtreras proverna samma dag och partiklar avskiljs via ett 293 mm glasfiberfilter och de lösta fraktionerna av PCB och PAH uppsamlas på polyuretanskum (PUF). Vid vattenfiltreringen belastas filter och PUF med ca 1 l provvatten per minut.

Efter varje provtagningsstillfälle filtreras upptagna prover. Innan samt efter avslutad filtrering sköljs alla filterdelar med 95% etanol, varefter ca 2-3 l kranvatten filtreras.

Hg

Prov för Hg samlas i syradiskade teflonflaskor. Vid all provhantering används plasthandskar. Proverna förvaras mörkt och kallt i kylskåp.

Appendix



Mark -ytprover

Markprover tas i anslutning till kammarprovtagningen (se nedan) i mitten eller i slutet av provtagningsperioden. Proven tas ut på ett djup av 0-10 cm vid fyra olika tillfällen: augusti/september, november/december, februari samt april.

Mark – djupprofiler

Prov för analys av PCB och PAH insamlas i glasburkar, medan prov för bestämning av kvicksilver insamlas i burkar av polypropenplast. På deponin tas totalt 6 markprover, jämnt spridda över området och med en profil 0-0.5 m. Dessa delas i två lika delar. Det ena provet för analys av PCB, PAH, torrsubbstans och glödförlust och det andra för analys av Hg, torrsubbstans och glödförlust. I sedimentationsbassängen tas totalt 8 markprover som delas på samma sätt som deponiproverna. Två profiler tas ut i mitten på bassängen 0-4 m. Varje prov består av 1 m. Dvs två prover 0-1 m, två prover 1-2 m, två prover 2-3 m och två prover 3-4 m. På utfyllnadsområdet tas totalt 5 markprov som delas enligt samma förfarande som för deponi och sedimentationsbassäng. Proverna tas ut mellan 0.3 - 0.6 m.

Kammarprover (avgång till luft från mark och vatten)

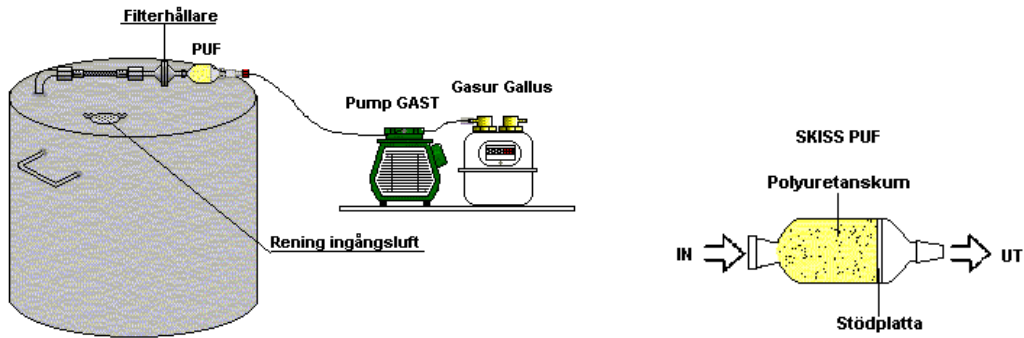
Mark till luft

PCB/PAH

På varje station placeras en huv av rostfritt stål enligt nedanstående skiss. Huvens trycks ned en bit i marken och tätas med en blandning av sand, bentonitlera och kranvatten.

Appendix

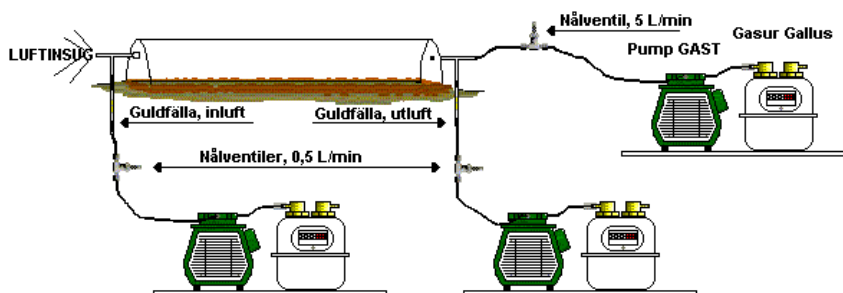
Sanden och bentoniten blandas i de ungefärliga proportionerna 4:1. Under huven placeras givaren till en digitaltermometer (max/min) för att kunna avläsa aktuell lufttemperatur och marktemperaturen inne i huven. Huven förses med ett glasfiberfilter (Whatman GF C) och ett polyuretanskumfilter för att rena ingående luft.



Provtagningen sker med glasfiberfilter och PUF:ar enligt beskrivningen för luft ovan. Anordningen ansluts till provtagningshuven via en 200 mm lång armerad teflonslang med ½ rörgänga i varje ände. Filterhållaren och teflonslangen gängas på ett kort anslutningsrör från huven. Alla gängningar tätas med teflongängtejp och luft pumpas igenom anordningen med en pump kopplad till ett gasur. Hela stationen skyddas med en fritt hängande presenning. Provtagningen sker under ca 10 - 14 dagar.

Totalkvicksilver

Kammaren för provtagning av totalkvicksilver är gjord av plexiglas. Guldfällor används som filter. Dessa består av kvartsrör fyllda med en blandning av guld och krossat kvartsglas alternativt kvartssand belagt med ett tunt guldsikt.



Appendix

Guldfälla, kvartssand och 24 karats guldbitar



Guldfälla, kvartssand belagt med tunt guldsikt



Huven tätas på samma sätt som PCB/PAH ovan. I plexiglashuvens båda ändar ansluts T- rör (PX-rör) i glas. Guldfällorna ansluts till T- rören både på ingående och utgående luft från plexiglashuven. Varje guldfälla ansluts med 6/4 dekoronslang via en nålventil (B-SS4) till varsin pump och gasur. Slutligen ansluts en pump med gasur till plexiglashuvens ena ände via en nålventil (B-4MG), med uppgift att suga ett s k supportflöde med ca 5 liter/minut genom huven under provtagningen. Provtagningen fortgår 1 h. Provtagningstiden kan varieras mellan 0.5 och 5 h, beroende på kvicksilvermängden i luften som avgår.

Vatten till luft

På varje station placeras en flotte, ca 2 x 2 meter, med två uppsågade hål för provtagningsutrustningen. Utrustningen skyddas med en presenning som spänns över flotten.

PCB/PAH

PCB/PAH provtas med rostfria huvar i princip på samma sätt som vid provtagning av avgång till luft från mark. Ingen tätning behövs, eftersom huvarna sänks ned ca 10 cm i vattnet. Två prov tas samtidigt på varje station. Dessutom tas ett luftprov på varje station i höjd med huvarnas överkant. 300 – 600 m³ luft provtas, vilket tar ca 12 – 14 dagar.

Hg

Hg provtas med plexiglashuvar på samma sätt som vid provtagning av avgång till luft från mark, med den skillnaden att huvarnas sidor förlängts med 30 cm för att kunna användas i vatten. Ingen tätning behövs, eftersom huvarna sänks ned ca 10 cm i vattnet. Två prov tas samtidigt på varje station. Provtagningstiden är ca 6 timmar med samma luftflöden som vid provtagning av avgång till mark från luft.

Appendix

Appendix 2 Analyismetoder

PCB-och PAH-analyser

Extraktion

Luft/Vatten/Deposition

Proven, adsorbenter (PUF-pluggar) och filter soxhletextraherades under 24 timmar med aceton. En interstandard sattes till proven efter det att extrakten från adsorbenter och filter slagits samman. Internstandarderna bestod av bb-binaphtyl och bromonaphtalene samt PCB 53 och PCB 208.

Efter soxhletextraktionen späddes acetonen med vatten i förhållandet 3:1 och vätske/vätske extraherades sedan två gånger med pentan. De båda organfaserna fördes samman och proven delades i två lika delar varav en utnyttjades för analys av PCB och en för PAH

Sediment/Mark

10-15 g vått prov, sediment eller mark, invägdes i en extraktionshylsa av glasfiber vilken placerades i en soxhletextraktor. Proven soxhletextraherades sedan under 24 timmar med en blandning av aceton/hexan i förhållandet 75:25. Före extraktionen sattes till aceton/hexan blandningen en interstandard bestående av, bb-binaphtyl och bromonaphtalene samt PCB 53 och PCB 208.

Samtidigt med att proven togs ut för analys av de organiska föreningarna invägdes också sediment för bestämning av torrsubstans, TS.

Efter soxhletextraktionen avskiljades hexanen genom att acetonen späddes med en 2% natriumsulfatlösning. Den spädda acetonfasen extraherades sedan med en blandning av pentan. De båda organfaserna fördes samman och provextrakten delades i två lika delar varav en utnyttjades för analys av PCB och en för PAH.

Analys av PCB

Före analys av de klorerade föreningarna behandlades proven med koncentrerad svavelsyra varefter de fraktionerades på en aluminiumoxidkolonn. En PCB-fraktion uppsamlades och proven koncentrerades till ca 1ml.

Appendix

Analysen utfördes på en gaskromatograf, Varian Modell 3800, med elektroninfångningsdetektor (GC-ECD) vilken var försedd med en 50 m lång kapillärkolonn (CP-Sil 8 CB, Chrompack Holland). PCB komponenterna identifierades och kvantifierades med hjälp av intern och extern standard (certifierad standard blandning från Larodan, NO813).

Vid analysen bestämdes 7 PCB-kongener med följande IUPAC nummer: 28, 52, 101, 118, 153, 138, 180. Dessa PCB är av varierande kloreringsgrad och de utgör vanligen mellan 15-20 % av total PCB. Total PCB-halten har uppskattas utgående ifrån tekniska PCB-blandningar.

Analys av PAH

Före analysen av PAH fraktionerades provet på en kiselgelkolonn, där en pentanfraktion innehållande opolära kolväten, dvs alifater och PAH uppsamlades. Proven uppenades sedan ytterligare genom s.k. "DMF-rening". Detta innebär att alifater avskiljs från provet genom extraktion med en blandning av dimetylformamid/vatten 9:1. Efter ytterligare vattentillsats återextraherades PAH komponenterna till en organfas, hexan, vilken koncentreras till 1 ml.

Analys av PAH på sediment- mark- och luftprov utfördes med gaskromatografi-masspektrometri (GC-MS). Den GC-MS utnyttjades var en Varian Saturn 2000 Ion-Trapp. Analyskolonnen var en 25 m lång kapillärkolonn med fas CP-Sil 8. CB PAH komponenterna identifierades och kvantifierades med hjälp av intern och extern standard (certifierad standard blandning SMR 1491).

PAH-analyserna i vattenproven utfördes på en vätskekromatograf av modell Varaiian Pro Star , M240 försedd med en flouescensdetektor, 9075, Varian. Den analytiska kolonnen har en "reversed phase"-typ av stationärfas, C₁₈ på 5 µm partiklar.

Kvalitetskontroll

IVLs laboratorium är ackrediterat för den upparbetnings- och analysmetodik som har använts för PCB. När det gäller PAH är IVL hittills ackrediterat för analys med HPLC-teknik. Förutom DMF-reningen (se ovan) är den extraktion och upparbetningsmetodik som är ackrediterad för HPLC metoden densamma som den som utnyttjats vid dessa analyser. HPLC metoden användes i denna undersökning för analys av vattenprov eftersom halterna i dessa prov var så låga att de skulle hamna under detektionsgränsen vid GC-MS analysen.

Vid soxhletextraktionen tillsattes interna standarder(se ovan) för att kunna korrigera för förluster under upparbetningen. Vid PCB analysen tillsattes även en s k insprutningsstandard för kontroll av GC-analysen.

Appendix

Renheten vid uppberedningen kontrollerades med hjälp av laboratorieblanker. Renheten av PUF-pluggar och filter kontrollerades med hjälp av fältblanker.

Kvantifieringen av de olika komponenterna har utförts med hjälp av certifierade standardblandningar. För PCB analyserades dessutom olika blandningar av Arochlor, vilka användes för att kontrollera separationen mellan olika PCB på analyskolonnen. De relativa standardavvikelsen vid analys av PAH och PCB standarder visas i tabell.

Utvärderingen av kromatogram sker med hjälp av ett labdatasystem, Varian Star. Integrationen kontrolleras och halterna beräknas med s.k. internstandardmetod. Beräkningarna kontrolleras genom att standarder analyseras och beräknas.

Detektionsgränsen varierar mellan prover beroende på faktorer som olika invägd mängd, variation i utbyte samt att vattenhalten i sediment varierar. De olika PCB komponenterna har dessutom olika respons på ECD-detektorn varför även detektionsgränsen varierar för samma prov. Vidare kan brus i GC-kromatogrammen varierar mellan olika analyser. För att kontrollera brus och andra störningar analyserades vid jämna mellanrum, förutom standarderna, även rent lösningsmedel.

I syfte att kontrollera hur uppberedning och analys fungerar för riktiga provmatriser analyseras s.k referensmaterial. I nedanstående tabell visas resultaten av två prover från referensmaterial CMR HS-5 ett sediment som analyserats avseende PAH.

PAH	Referensmaterial CRM HS-5	Prov 1	Prov2
	µg/g	µg/g	µg/g
Phenanthrene	5.2	5.6	4.7
Anthracene	0.38	0.31	0.35
Fluoranthene	8.4	9.0	7.3
Pyrene	5.8	6.2	5.0
Benzo(a)anthracene	2.9	2.5	2.3
Chrysene	2.8	3.7	3.2
Benzo(b)fluoranthene	3	3.7	3.5
Benzo(k)fluoranthene	1	1.0	1.1
Benzo(a)pyrene	1.7	1.5	1.7
Benzo(ghi)perylene	1.3	1.8	1.7
Indeno(cd)pyrene	1.3	1.6	1.5

Metodiken för extraktion, uppberedning samt analys av PCB i sediment har testats genom att analysera 6 replikat. Eftersom dessa sediment förväntades innehålla låga halter av

Appendix

PCB utnyttjades 30 g sediment. I nedanstående tabell visas koncentration och relativ standard avvikelse

PCB	ng/g dw	RSD %
28	0.14	9.8
53	0.05	5.7
52	0.12	9.4
101	0.16	3.2
118	0.19	6.5
153	0.26	2.7
138	0.08	6.2
180	0.99	4.0

Halterna har korrigerats efter internstandard. Utbyten varierade mellan 68-74%

Extraktion av sedimenten utfördes med soxhletextraktion. För att kontrollera extraktionseffektivitet utfördes denna extraktion under ytterligare 24 timmar. Resultatet av dess a försök visade att ca 2-3 % av PCB extraherades under 2:a dygnet. En liknade test har även utförts för PAH men analysen utfördes då med hjälp av HPLC-teknik. Test av soxhletextraktionen visade samma resultat som för PCB dvs ca 2-3% återfanns i andra extraktion. Halterna mellan replikaten varierade dock något mer än för PCB vilket kan bero på att HPLC är mindre reproducerbar än GC.

Hg-analyser

Bestämning av Hg(tot) i vatten

Metoden är väl dokumenterad i den vetenskapliga litteraturen och kan användas för bestämning av totalkvicksilver i alla typer av naturliga vatten samt avloppsvatten o.dyl.

Metodsammanfattning

Före analys behandlas vattenprovet med brommonoklorid varvid kvicksilvret överförs till reducerbar form. Detektionen av kvicksilver baseras på kall atomfluorescens, utnyttjande emission vid 253.7 nm från exciterade Hg⁰ atomer i en inert Ar-gasström. Kvicksilvret separeras från lösningen genom reduktion av i uppslutningen befintlig Hg(II) till Hg⁰ med hjälp av SnCl₂. Provet avbubblas med Hg-fri N₂-gas och Hg⁰ fångas på en guldfälla (provfällan). I avsikt att ytterligare förkoncentrera provet samt minska interferenser överförs kvicksilvret via termisk desorbition till en andra guldfälla, analysfällan. I det slutliga analyssteget desorberas analysfällan termiskt och Hg⁰ förs via en ström av argon till fluorescenscellen. Fluorescensens intensitet, uttryckt som arean av en topp, är direkt proportionell av mängden kvicksilver varför responsen är linjär i

Appendix

aktuellt mätområde. Koncentrationen kvicksilver i ursprungligt prov beräknas genom division av erhållen mängd kvicksilver med motsvarande uppvägd mängd avbubblat vatten.

Metoden är anpassad för bestämning av Hg(tot) i intervallet 0.1 – 1000 ng l⁻¹. Vid bestämning av högre halter krävs spädning av provet. Typisk detektionsgräns för bestämning av total-kvicksilver i vatten är 0.06 ng/L.

Bestämning av Hg(tot) i mark och sediment

Metodsammanfattning. Provet uppsluts med salpetersyra i autoklav. Efter reduktion med tennklorid analyseras Hg med flamlös atomabsorptionsspektrofotometri enligt SS 028175. Detektionsgränsen är 0.01 mg/kg TS.

Provtagning och analys av gasformigt kvicksilver (Total Gaseous Mercury - TGM)

Provtagningsmetoden är baserad på kvicksilvers förmåga att bilda amalgam med guld. Med hjälp av en luftpump sugs luft genom ett kvartsglasrör innehållande korn av gediget guld alternativt kvartsglaskross belagt med guld. Samtidigt mäts den totala luftvolymen med en volymmätare. Vid analys leds argongas genom fällan och kvicksilvret ångas av genom pyrolys. Kvicksilver som avgår leds till en fluorescensspektrometer för detektion (Brosset, 1987; Bloom and Fitzgerald, 1988). Vid ett 4 h prov (provtagningshastighet av 0.5 l/min) erhålls en detektionsgräns av 0.05 ng/m³.

Provtagning och analys av partikulärt kvicksilver (Total Particulate Mercury - TPM)

Ett kvartsglasfilter (Munktell MK 360), med en diameter på 7 mm, är placerat i ett 140 mm långt kvartsglasrör. Filtret vilar mot en 0.1 mm tjock perforerad folie av rent nickel. Luft som skall provtas sugas genom kvartsglasröret med en flödeshastighet av 4-6 l/min. Filterfällan analyseras genom pyrolys, varvid allt kvicksilver reduceras till elementärt gasformigt kvicksilver. Mängden Hg detekteras med fluorescensspektrometer helt analogt med analys av TGM enligt ovan. Provtagningsmetoden har en detektionsgräns på 1.0 pg/m³ för en provtid på 21 h.

Referenser:

Bloom, N.S. and Fitzgerald, W.F. "Determination of volatile mercury species at the picogram level by low-temperature gas chromatography with cold vapor atomic fluorescence detection" *Analytica Chimica Acta* 209, **1988**, 151-161.

Brosset, C. "The behaviour of mercury in the physical environment" *Water, Air and Soil Pollut.* 34, **1987**, 145-166.

Appendix

Appendix 3. Tvåfilmsmodellen

För avgång från vatten till luft användes förutom kammarmetoden ytterligare en beräkningsmetod, som baseras på den så kallade tvåfilmsmodellen (Whitman 1923). Istället för koncentrationer används dock fugacitetsbegreppet vid beräkningen, enligt det förfarande som beskrivs av Mackay (2001). Genom att konvertera uppmätta koncentrationer i vatten och luft till fugacitet kan kemikalieflödet beräknas genom ekvationen:

$$N = D_{VOL} (f_V - f_L) \text{ mol/h} \quad (2)$$

där D_{VOL} (mol/Pa×h) är en transportkoefficient som beskriver volatiliseringshastigheten, f_V fugaciteten i vattenfasen och f_L fugaciteten i luft. Fluxen kan sedan omvandlas till avgång i gram med hjälp av molvikten för det aktuella ämnet.

Fugaciteten beräknas utifrån koncentrationen genom ekvationen:

$$f_i = C_i/Z_i \quad (3)$$

där f_i = fugaciteten (Pa), C_i = koncentrationen (mol/m³) av ämnet i den aktuella fasen och Z_i = fugacitetskapaciteten (mol/m³ Pa) för ämnet hos den aktuella fasen.

Z-värdet beräknas olika beroende på vilken fas det handlar om, och kan för vatten och luft beskrivas enligt nedan (Mackay, 2001):

- $Z_{\text{luft}} = Z_L = 1/RT$ (4)

där $R = 8.314 \text{ J/mol K}$ och $T = \text{temperaturen (K)}$

- $Z_{\text{vatten}} = Z_V = 1/H$ (5)

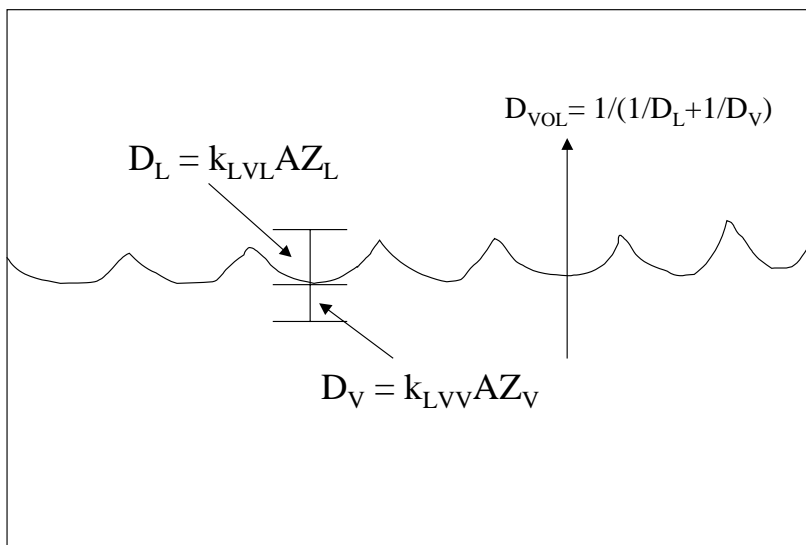
där $H = \text{Henry's Lags konstant (Pa m}^3/\text{mol)}$.

Transportkoefficienten D_{VOL} för vatten kan beskrivas enligt

$$\frac{1}{D_{vol}} = \frac{1}{D_V} + \frac{1}{D_L} = \frac{1}{k_{LVV}AZ_V} + \frac{1}{k_{LVL}AZ_L} \quad (7)$$

där D_V = transportparametern för vatten och D_L = transportparametern för luft. A står för arean av den studerade ytan (m²), och k -värdena är masstransportkoefficienter som bestämmer hastigheten på transporten över gränsskiktet vatten/luft. Figur 1 visar principen för volatilisering från vatten och förklarar även var respektive k -värde bestämmer transporten.

Appendix



Figur 1. Volatilisering från vatten

D- samt k-värden kan inte mätas direkt. De måste antingen uppskattas eller beräknas utifrån direkta mätningar av luftavgången. I föreliggande fall finns denna typ av mätningar ej tillgängliga varför experimentella värden på masstransportkoefficienterna ej kunde erhållas. Därför användes istället de värden på masstransportkoefficienterna som rekommenderas av Mackay (2001).

$$k_{LVV} = 0.03 \text{ m/h}$$

$$k_{LVL} = 3.0 \text{ m/h}$$

Korrigerig för temperaturberoende

Det är allmänt känt att temperaturen har betydande effekt på många fysikalisk-kemiska egenskaper såsom t ex Henry's Lags konstant (och därmed ångtryck) och vattenlöslighet. För att ta hänsyn till temperaturberoendet för dessa egenskaper har vi i föreliggande studie använt oss av följande samband (D Mackay, pers. komm, och F Wania, pers. komm):

$$K_{AW,ref} = \frac{H_{ref}}{R \times T_{ref}} \quad (8)$$

där $K_{AW,ref}$ är den dimensionslösa fördelningskonstanten mellan luft och vatten vid referenstemperaturen, H_{ref} = Henry's Lags konstant vid referenstemperaturen ($\text{Pa}/\text{m}^3 \text{ mol}$), R = allmänna gaskonstanten = $8,314 \text{ (Pa} \times \text{m}^3/\text{mol} \times \text{K)}$ och T_{ref} är referenstemperaturen i K.

Appendix

Fördelningskonstanten K_{AW} korrigeras därefter för temperaturen enligt:

$$K_{AW,T} = K_{AW,ref} \times e^{\left(\frac{\Delta_{AW}H}{R} \times \left(\frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T_{exp}} \right) \right)} \quad (9)$$

där $K_{AW,T}$ är den temperaturkorrigerade fördelningskonstanten, $\Delta_{AW}H$ (J/mol) är entalpiförändringen vid fasövergången från vatten till luft och T_{exp} är den aktuella vattentemperaturen i K.

Ur dessa samband fås en temperaturkorrigerad Henry's Lags konstant enligt:

$$H_T = K_{AW,T} \times R \times T_{exp} \quad (10)$$

där H_T är den temperaturkorrigerade Henry's Lags konstant ($\text{Pa m}^3/\text{mol}$).

Med denna metod beräknades sedan fluxerna av de fyra utvalda ämnena från vatten till luft. De koncentrationer som användes vid beräkningen var de vattenkoncentrationer som uppmätts i ytvatten vid varje mätstation, samt den luftkoncentration som erhöles vid referenspunkten ca 2 m ovanför kamrarna.

Appendix

Appendix 4. Indata till CoZMo-POP modellen

Miljöparametrar för Örserumsområdet

Parameter	Område	Värde	Referens
Yta (km ²)	Avrinningsområde	28.9	MKB (2000)
	Kustområde	0.4	MKB (2000)
Nederbörd (cm/år)	Avrinningsområde	53.2	SMHI (Gladhammar)
	Kustområde	53.2	SMHI (Gladhammar)
Vindhastighet (m/s)	Avrinningsområde	2.5	SMHI
	Kustområde	3.2	analogt Wania et al. (2000)
Andel sötvatten		0.05	Info från topografisk karta
Andel skog		0.85	Info från topografisk karta
Luftparametrar			
Andel partiklar i luft (m ³ /m ³)		1×10 ⁻¹¹	Wania et al. (2000)
Atmofärshöjd (km)		0.6	analogt Stockholm (Palm 2001)
Uppehållstid luft (h)		0.61	Beräknat från luftvolym och vindhastighet
“Ursköljningskvot”		68000	Wania et al. (2000)
Stabilitet hos vinteratmosfär relativt sommarförhållanden		3	Wania et al. (2000)
Regressionsparameter för $K_{QA} = M_Q * K_{QA}^{NQ}$	Avrinningsområde	3.5/1	Wania et al. (2000)
Markparametrar			
Markdjup (m)	Skogsmark	0.1	Wania et al. (2000)
	Jordbruksmark	0.2	Wania et al. (2000)
Andel luft i mark (m ³ /m ³)	Skogsmark	0.25	Wania et al. (2000)
	Jordbruksmark	0.25	Wania et al. (2000)
Andel vatten i mark (m ³ /m ³)	Skogsmark	0.25	Wania et al. (2000)
	Jordbruksmark	0.25	Wania et al. (2000)
Andel suspenderat material i markavrinningsvatten (m ³ /m ³)	Skogsmark	0.0001	Wania et al. (2000)
	Jordbruksmark	0.0005	Wania et al. (2000)
Andel organiskt kol i fasta markpartiklar (g/g)	Skogsmark	0.02	Wania et al. (2000)
	Jordbruksmark	0.02	Wania et al. (2000)
Andel vatten av totalt vattenflöde som evaporerar från mark (m ³ /m ³)	Skogsmark	0.25	Wania et al. (2000)
	Jordbruksmark	0.6	Wania et al. (2000)
Masstransportkoefficient (MTC) luft över mark (m/h)	Skogsmark	0.416	Wania et al. (2000)
	Jordbruksmark	2.08	Wania et al. (2000)
Minsta MTC inom mark (m/h)	Skogsmark	0.005	Wania et al. (2000)

Appendix

Parameter	Område	Värde	Referens
Maximal torr partikeldeposition till mark (m/h)	Jordbruksmark	0.01	Wania et al. (2000)
	Skogsmark	0.206	Wania et al. (2000)
Regressionsparameter för $K_{POC} = M_{POC} * K_{OW}$	Jordbruksmark	1.03	Wania et al. (2000)
	Skogsmark	0.41	Wania et al. (2000)
	Skogsmark	0.41	Wania et al. (2000)
	Jordbruksmark	0.41	Wania et al. (2000)
Vattenparametrar			
Vattendjup (m)	Sötvatten	1.5	C Ramström, pers. komm.
	Kustvatten	3	MKB (2000)
Sedimentdjup (m)	Sötvatten	0.05	Wania et al. (2000)
	Kustvatten	0.05	Wania et al. (2000)
Andel av totalt vattenflöde som evaporerar från vatten	Sötvatten	0.2	Wania et al. (2000)
	Kustvatten	1	Wania et al. (2000)
Koncentration partikulärt organiskt kol (POC) i vatten (mg/L)	Sötvatten	3	Medelvärde från mätningar
	Kustvatten	1	Från mätningar
	Havsvatten	1	Wania et al. (2000)
Andel organiskt kol i sediment (g/g)	Sötvatten	0.23	Från mätningar
	Kustvatten	0.23	Från mätningar
Primärproduktion (g/m ² ×år)	Sötvatten	100	Wania et al. (2000)
	Kustvatten	250	Wania et al. (2000)
Mineraliseringsintensitet i vatten (g/g)	Sötvatten	0.85	Wania et al. (2000)
	Kustvatten	0.8	Wania et al. (2000)
Resuspensionsintensitet (g/g)	Sötvatten	0.75	Wania et al. (2000)
	Kustvatten	0.5	Wania et al. (2000)
Mineraliseringsintensitet i ytsediment (g/g)	Sötvatten	0.75	Wania et al. (2000)
	Kustvatten	0.75	Wania et al. (2000)
Andel fasta partiklar i sediment (m ³ /m ³)	Sötvatten	0.2	Från mätningar
	Kustvatten	0.2	Från mätningar
Bioturbation diffusivitet (m ² /h)	Sötvatten	1x10 ⁻¹⁰	Wania et al. (2000)
	Kustvatten	1x10 ⁻¹⁰	Wania et al. (2000)
Sedimentfokuseringsfaktor	Sötvatten		
	Kustvatten		
Torrdeposition till vatten (m/h)	Sötvatten	1.03	Wania et al. (2000)
	Kustvatten	1.03	Wania et al. (2000)
Regressionsparameter för $K_{POC} = M_{POC} * K_{OW}$	Sötvatten	0.41	Wania et al. (2000)
	Kustvatten	0.41	Wania et al. (2000)

Appendix

Parameter	Område	Värde	Referens
Skogsparametrar			
Andel barrträd av skog		0.3	Info från topografisk karta
Andel vatten av totalt vattenflöde som evaporerar från skog		0.35	Wania et al. (2000)
Maximal torrdeposition av partiklar till skog (m/h)	Barrskog	3.4	Wania et al. (2000)
	Lövskog	27	Wania et al. (2000)
Maximal torrdeposition av "gasformiga ämnen" till skog (m/h)	Barrskog	42.1	Wania et al. (2000)
	Lövskog	130	Wania et al. (2000)
Specifik kronvolym per markyta (m ³ /m ²)	Barrskog	0.0017	Wania et al. (2000)
	Lövskog	0.0012	Wania et al. (2000)
Fördelningsrelation för trädkronor: $K_{\text{kronor/luft}} = M \cdot K_{\text{OA}}^N$	Barrskog	M=38 N=0.69	Wania et al. (2000)
	Lövskog	M=14 N=0.76	Wania et al. (2000)
Fraktion av löv som stannar på träden vintertid (%)	Lövskog	0.1	Wania et al. (2000)
Medellivslängd hos barr (år)	Barrskog	5	Wania et al. (2000)

Meterologiska parametrar i Örserumsområdet.

Månad	Temperatur i luft (K) ¹	Temperatur i kustvatten (K) ²	Vindhastighet över mark ² /vatten ³ (m/s)	Koncentration OH-radikaler (molekyler/cm ³) ⁴
Januari	270.55	275.8	3.4/4.4	120000
Februari	270.45	274.6	3.1/4.1	175000
Mars	273.35	275.8	3.4/4.4	250000
April	277.75	280.2	2.2/3.2	400000
Maj	283.35	286.4	2.7/3.7	550000
Juni	288.15	286.9	2.9/3.9	650000
Juli	289.65	291.2	2.3/3.3	650000
Augusti	288.85	291	1.9/2.9	550000
September	284.85	286.8	1.9/2.9	400000
Oktober	280.55	282	2.0/3.0	250000
November	275.75	279	2.1/3.1	175000
December	272.15	276.1	2.3/3.3	120000

¹ SMHI (2001)² Mätningar³ Uppskalning analogt med Wania et al. (2000)⁴ Wania et al. (2000)

Appendix

Emissionsparametrar till Örserumsområdet

Parameter	PCB 28	PCB 153	Fluoranthene
Andel till luft (ton/ton)	0	0	1
Andel till skog (ton/ton)	0	0	0
Andel till skogsmark (ton/ton)	0	0	0
Andel till jordbruksmark (ton/ton)	0	0	0
Andel till sötvatten (ton/ton)	0	0	0
Andel till kustvatten (ton/ton)	1	1	0
Skalningsfaktor	0.55	0.0009	0.1
Emissionsamplitud	0	0	0
Månad med emissionsmaximum	-	-	-
Fugacitet i inkommande luft (Pa)	0	0	0
Fugacitet i inkommande vatten (Pa)	0	0	0

IVL Svenska Miljöinstitutet AB

IVL är ett oberoende och fristående forskningsinstitut som ägs av staten och näringslivet. Vi erbjuder en helhetssyn, objektivitet och tvärvetenskap för sammansatta miljöfrågor och är en trovärdig partner i miljöarbetet.

IVLs mål är att ta fram vetenskapligt baserade beslutsunderlag åt näringsliv och myndigheter i deras arbetet för ett bärkraftigt samhälle.

IVLs affärsidé är att genom forskning och uppdrag snabbt förse samhället med ny kunskap i arbetet för en bättre miljö.

Forskning- och utvecklingsprojekt publiceras i

IVL Rapport: IVLs publikationsserie (B-serie)
IVL Nyheter: Nyheter om pågående projekt på den nationella och internationella marknaden
IVL Fakta: Referat av forskningsrapporter och projekt
IVLs hemsida: www.ivl.se

Forskning och utveckling som publiceras utanför IVLs publikationsservice registreras i IVLs A-serie. Resultat redovisas även vid seminarier, föreläsningar och konferenser.



IVL Svenska Miljöinstitutet AB

IVL Swedish Environmental Research Institute Ltd

P.O.Box 210 60, SE-100 31 Stockholm
Hälsingegatan 43, Stockholm
Tel: +46 8 598 563 00
Fax: +46 8 598 563 90

P.O.Box 470 86, SE-402 58 Göteborg
Dagjämningsgatan 1, Göteborg
Tel: +46 31 725 62 00
Fax: +46 31 725 62 90

Aneboda, SE-360 30 Lammhult
Aneboda, Lammhult
Tel: +46 472 26 77 80
Fax: +46 472 26 77 90

www.ivl.se