

Kemisk oxidation av PAHer i jord

Multivariat utvärdering av PAHers egenskaper och jordparametrars inverkan på oxidationseffektiviteten

Sofia Jonsson

Tillgänglighet av PAH i jord

Frågeställningar

Vilka parametrar styr oxidationseffektiviteten och tillgängligheten vid direkt oxidation av PAHer i jord?

Kan fältprover undersökas?

Verktyg

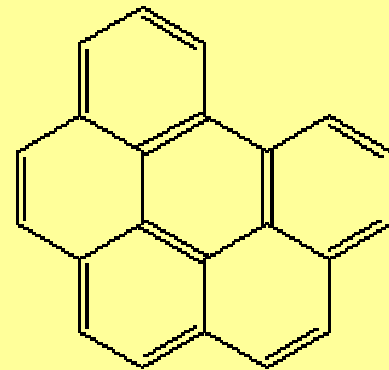
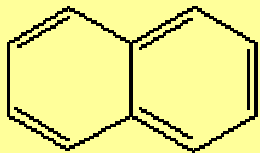
- Mild kemisk oxidation
- 10 jordprover, 5 platser
- Multivariat datautvärdering av
 - Jordkaraktäristik
 - PAHers kemikaliska och fysikaliska egenskaper

Oxidationsmetod

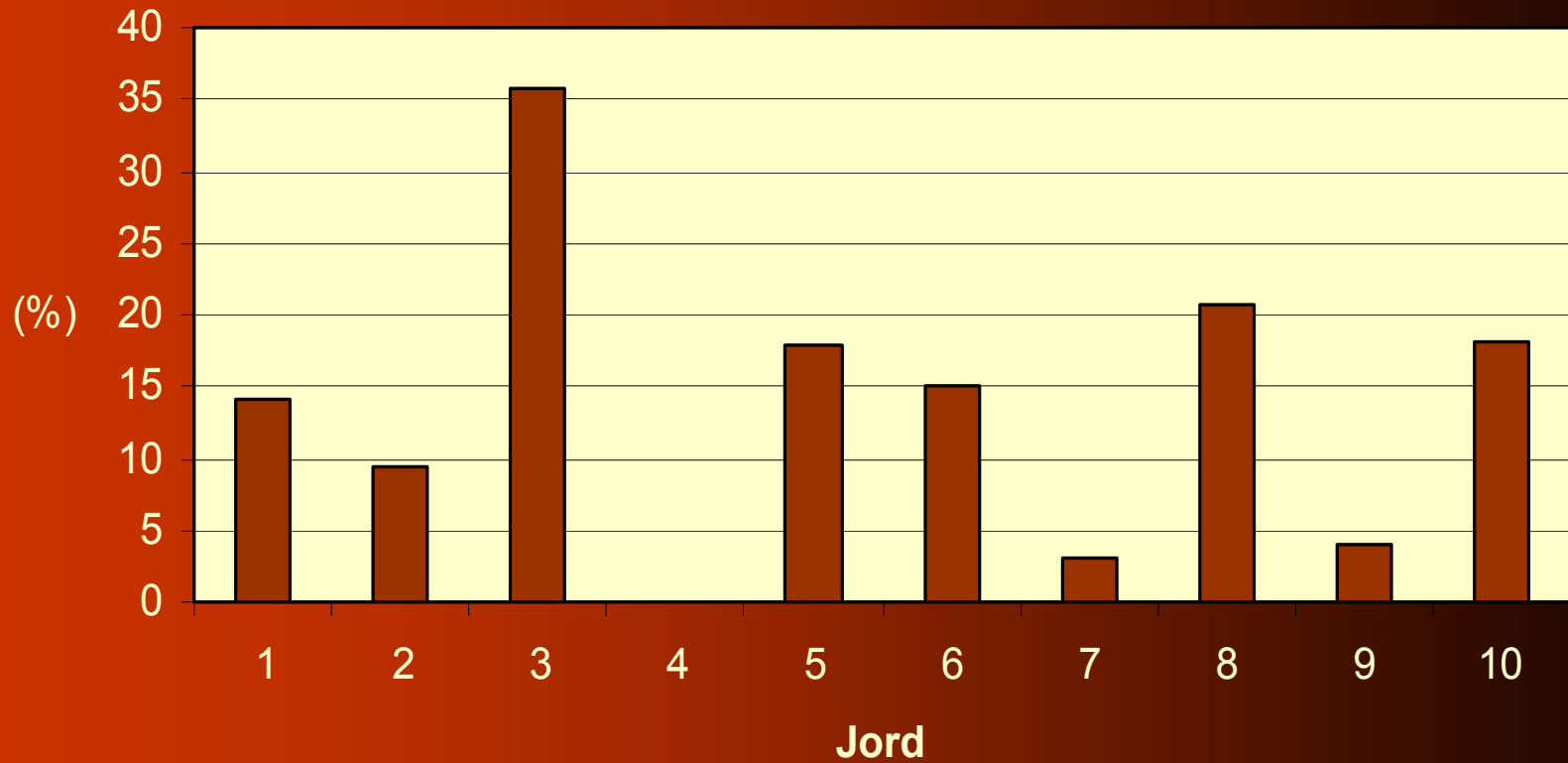
- Fenton's reagens
 - Radikalreaktion (OH^\bullet)
 - Väteperoxid
 - Fe^{2+} - katalyserad reaktion
- Metoden
 - Jordslurry 1: 3
 - 5 % H_2O_2
 - pH 3
 - 25 °C
 - 24 h



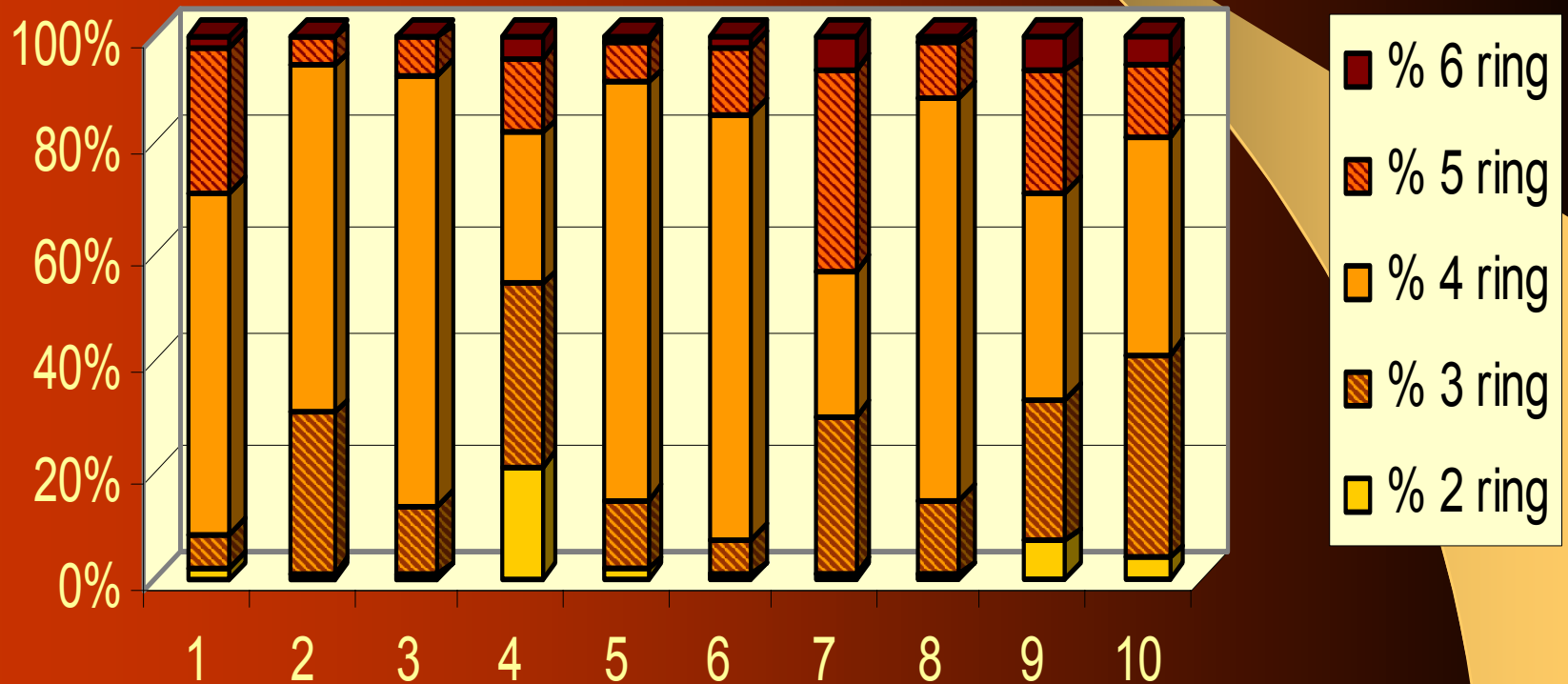
Oxidation av 24 PAHer



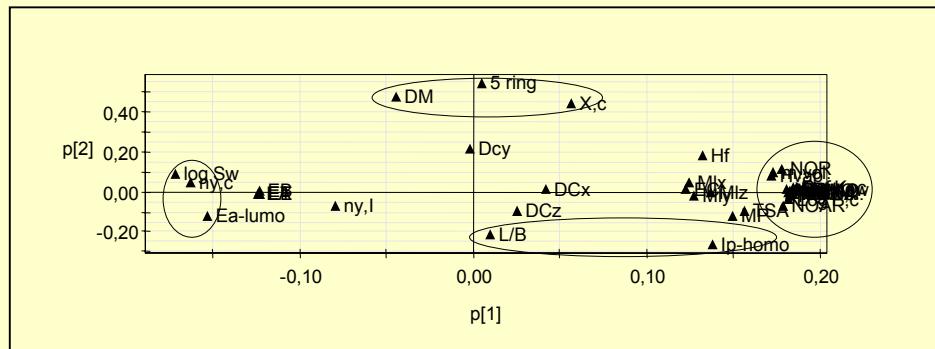
Oxidationseffektivitet



Fördelning av aromatiska ringar



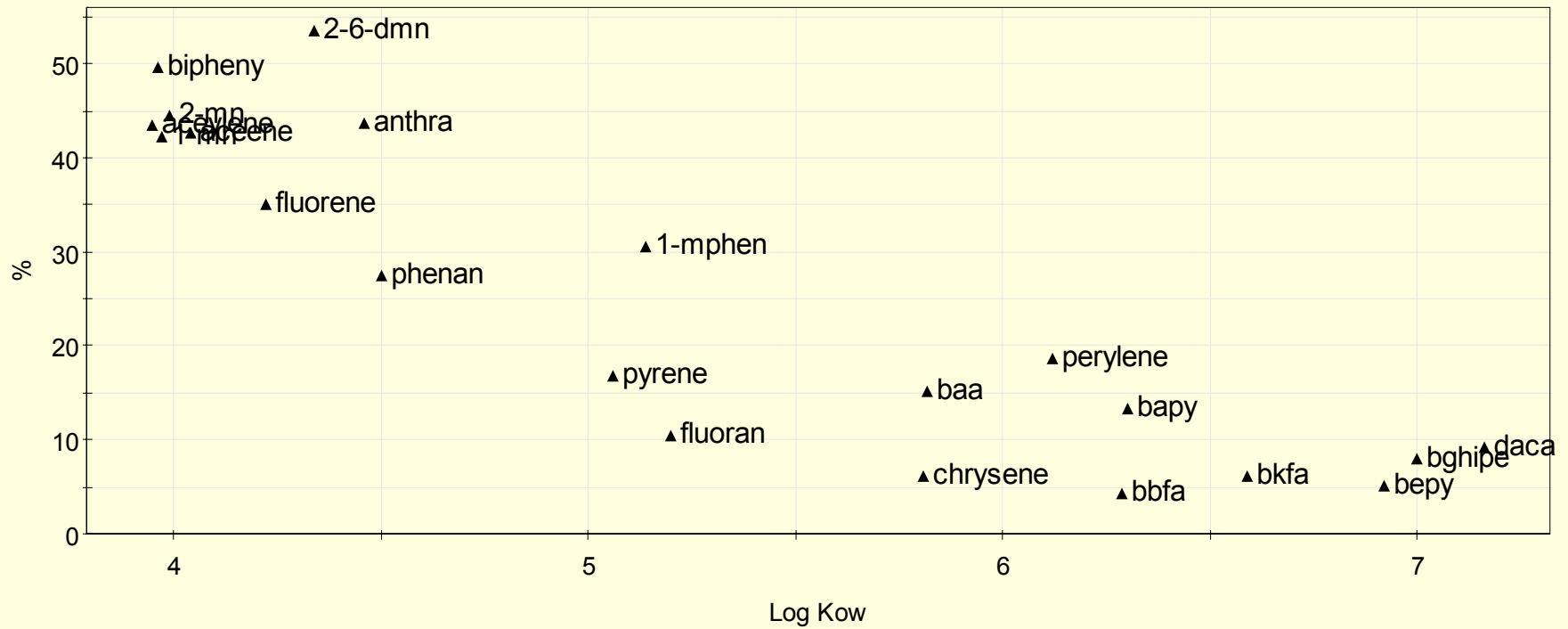
PCA för kem/fys data



- X,I
- Ref
- BP
- Mw
- HOMO
- LUMO
- Pol
- Log Kow
- Log Koc
- VdVW
- VdVA
- Vol
- LogP,I
- Area
- F
- Mol.vol.

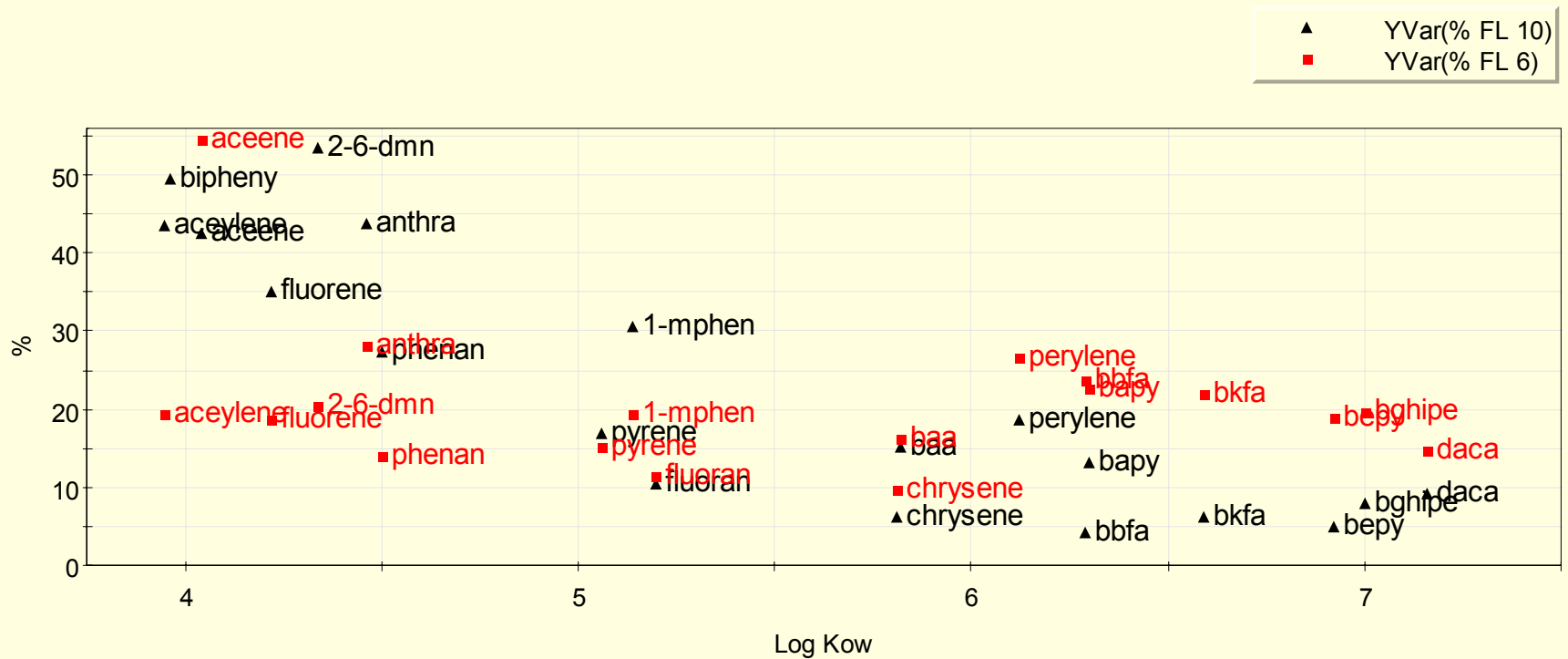
Log K_{ow}

Jord 10



Log K_{ow}

Jord 10 & Jord 6



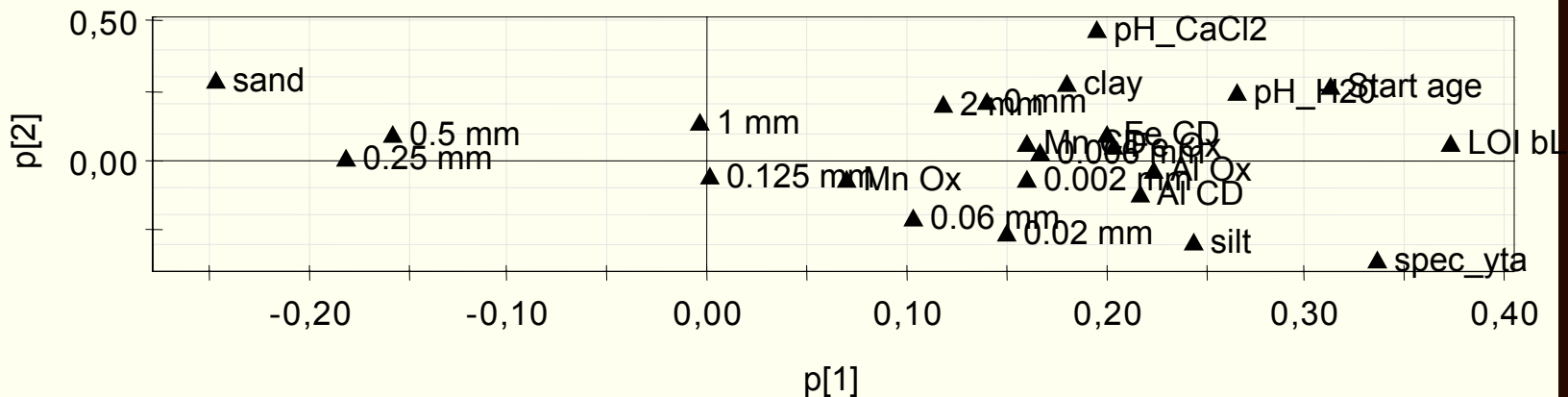
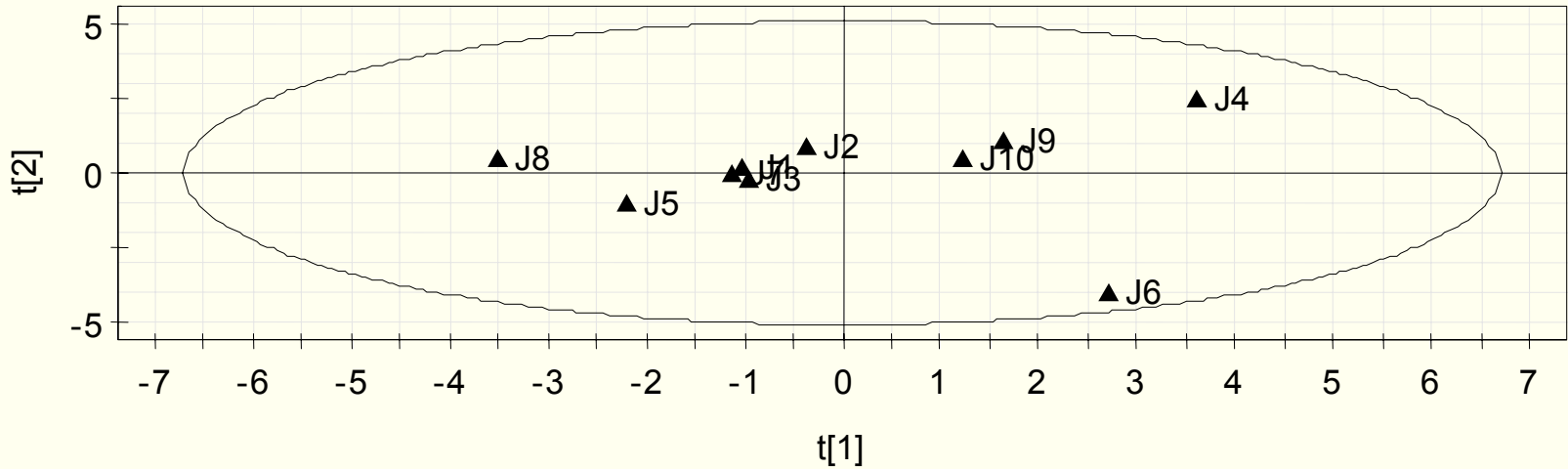
Jordkaraktärisering

- Start aktivitet
- Slut aktivitet
- Ler
- Silt
- Sand
- Spec yta
- Glödförlust (LOI)
- Al CD
- Al Ox
- Fe CD
- Fe Ox
- Mn CD
- Mn Ox
- pH
- Konduktivitet

Jordkarakterisering

Jord	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Start aktivitet	62	62	62	-	68	68	52	52	108	108
Ler (%)	0.0	0.3	0.2	0.4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.2	<i>n.a.</i>
Silt (%)	5.6	4.9	7.4	15.1	4.8	36.0	3.7	0.1	7.6	<i>n.a.</i>
Sand (%)	94.4	94.8	92.4	84.5	95.2	64.0	96.3	99.9	92.2	<i>n.a.</i>
Spec yta	1075	1111	1207	1643	1034	2610	982	800	1218	<i>n.a.</i>
LOI	9.8	6.9	2.7	13.4	2.6	12.8	6.8	2.2	18.5	12.0

PCA Jorkarakteristik



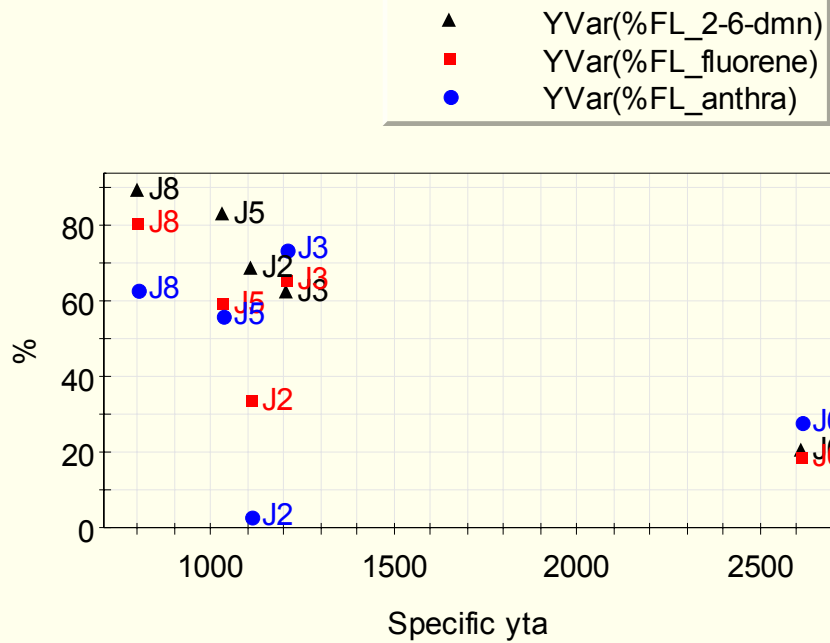
PLS modeller

Jordkaraktäristik

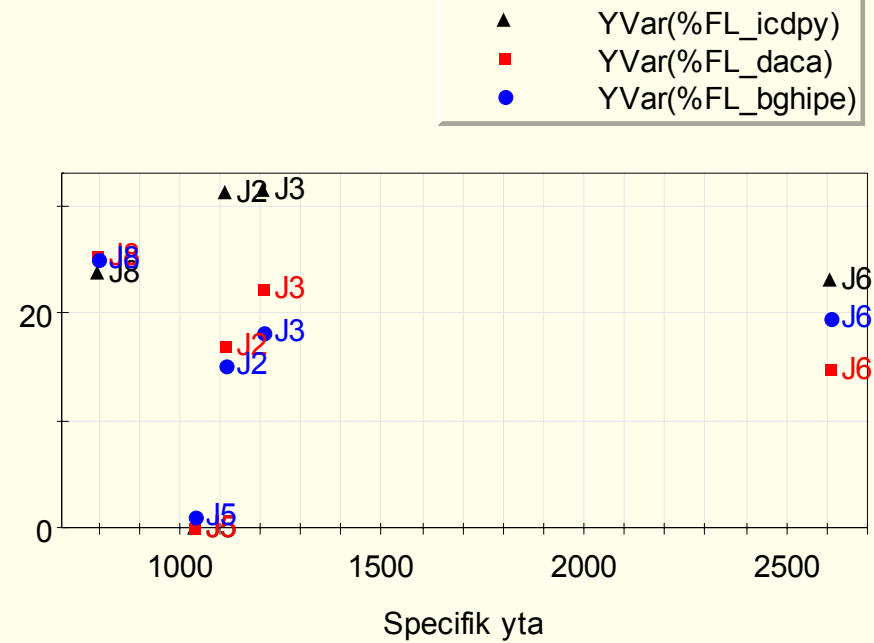
<u>Model</u>	<u>Description</u>	<u>PC</u>	<u>R²X</u>	<u>R²Y</u>	<u>Q²X(cum)</u>
1	2-3 NOAR	2	0,831	0,625	0,0953
2	4 NOAR	2	0,822	0,564	0,0364
3	5-6 NOAR	2	0,822	0,656	-0,183

Specifik yta

2-3 NOAR

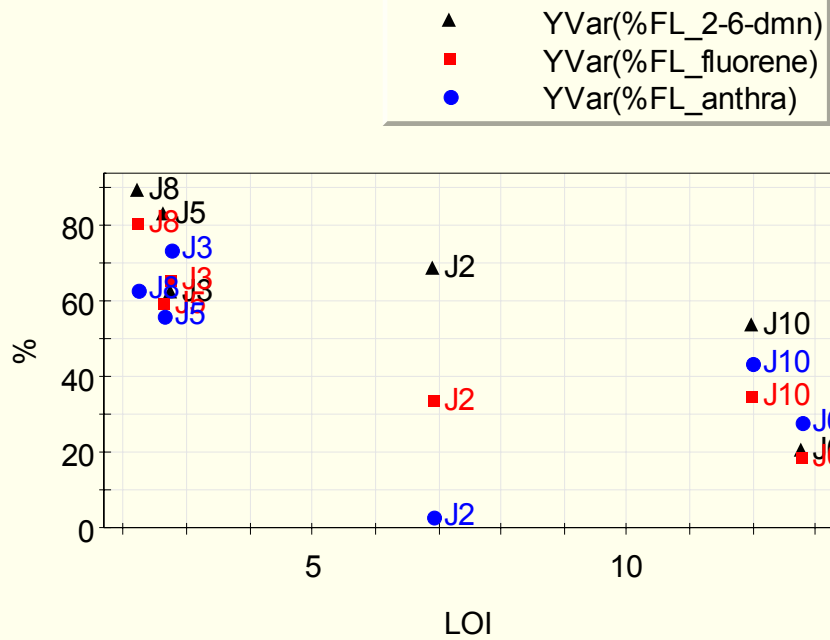


5-6 NOAR

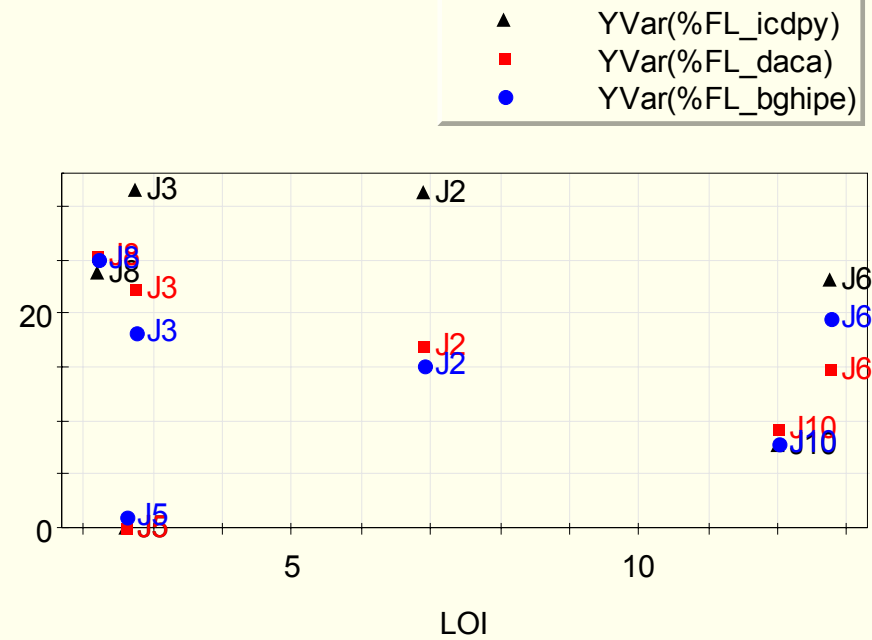


Glödförlust

2-3 NOAR

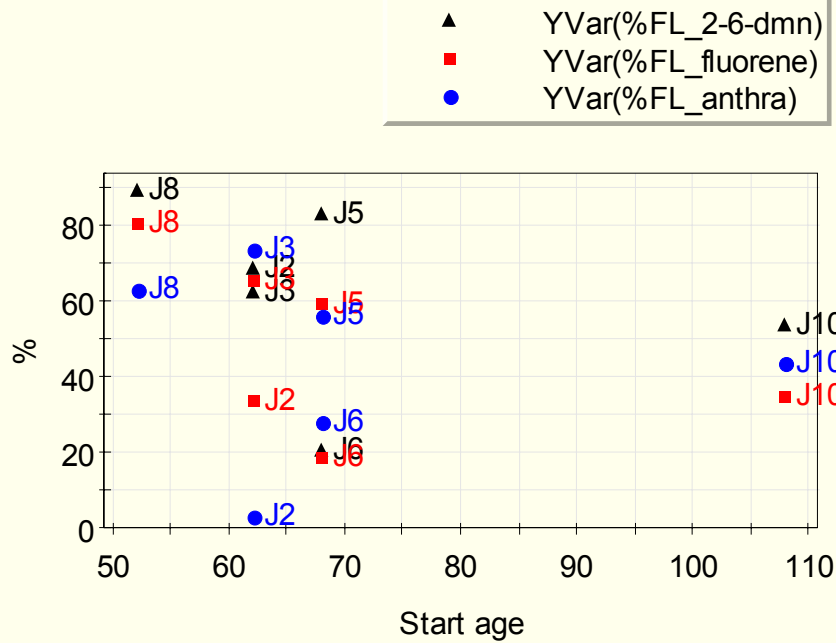


5-6 NOAR

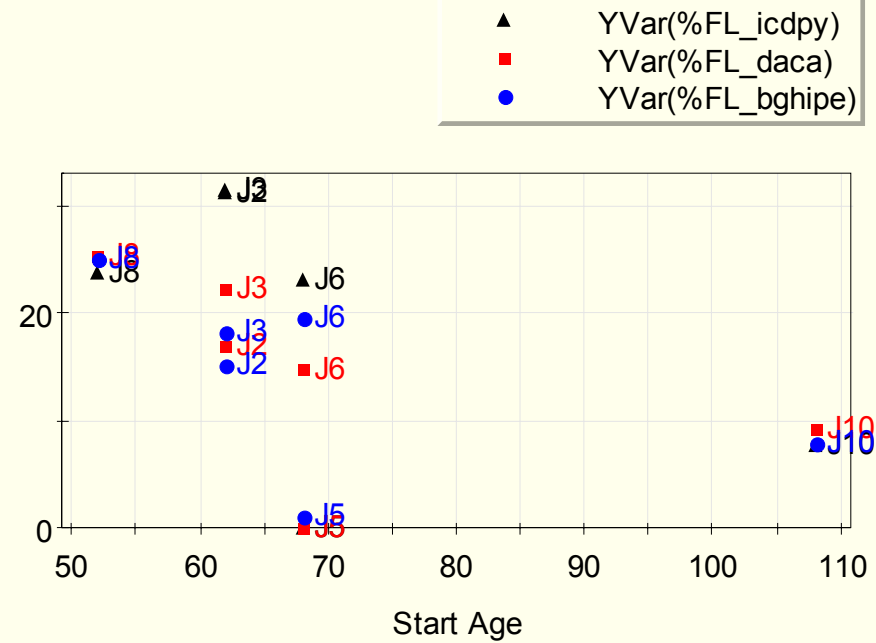


Ålder

2-3 NOAR



5-6 NOAR



Slutsatser

- Oxidationen minskar med ökande hydrofobicitet
- Minskande oxidation med:
 - ✓ Större specifik yta och högre glödförlust främst för 2-3 ringade PAHer
 - ✓ Ökande ålder av förorening främst för 5-6 ringade PAHer

Kommentarer

- Parametrar kan kontrolleras strikt med spikade prover
- Risk att missa viktiga samspel mellan olika parametrar genom att enbart titta på spikade prov
- Med multivariat utvärdering kan samband hittas och viktig information extraheras ut även med fältprover

Tack för mig



Tack för mig

