



VYSOKÁ ŠKOLA CHEMICKO-TECHNOLOGICKÁ V PRAZE

# MODELOVÁNÍ SORPCE TĚKAVÝCH ORGANICKÝCH LÁTEK NA ORGANICKOU HMOTU A NA MINERÁLNÍ SLOŽKY V ZEMINÁCH

Ing. Veronika Rippelová  
doc. Ing. Josef Janků, CSc.

ÚCHOP

# Cíl práce

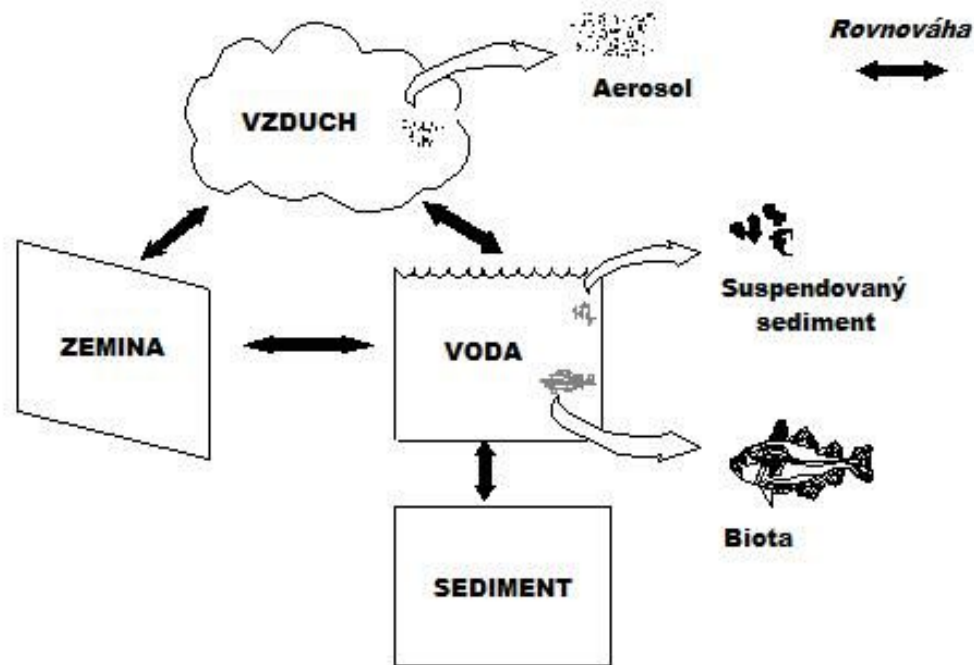
- Řešení problematiky interpretace výsledků atmogeochemického průzkumu na lokalitě kontaminované VOC
- Jak pomocí sorpčních mechanismů VOC – zemina v nesaturované zóně odhadnout obsah VOC v jednotlivých fázích zeminy

$$\text{mg.m}^{-3} \Rightarrow \text{mg.kg}_{\text{sušiny}}^{-1}$$

# Distribuce chemické látky v ŽP

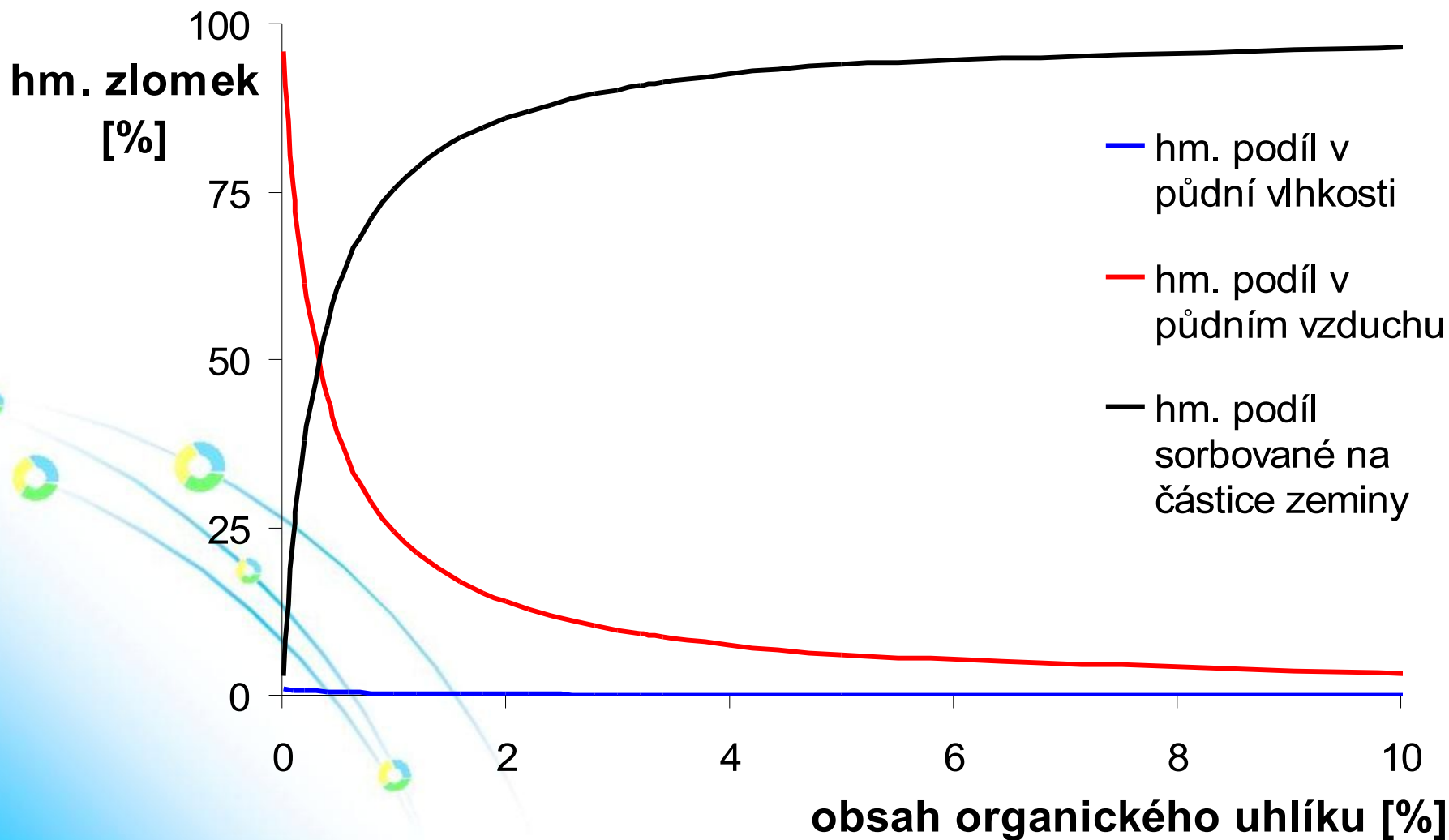
$$f = \frac{M}{\sum_i (V_i Z_i)}$$

rovnovážný stav,  
bez reakce,  
uzavřený systém



Podmínka rovnováhy – Pokud jsou složky v systému v rovnováze, fugacita látky je v každé fázi stejná.

# Distribuce VOC mezi složky zeminy



# Distribuce VOC mezi složky zeminy

Složka	Definice $Z_i$
Vzduch	$\frac{1}{RT}$
Voda	$\frac{1}{H} = \frac{C^s}{P^s}$
Zemina, sediment	$\frac{K_d \rho_s}{H}$

Z fugacity lze vypočítat koncentraci chemické látky v libovolné složce životního prostředí charakterizované fugacitní kapacitou  $Z_i$ .

$$C_i = f \cdot Z_i$$

# Sorpce VOC v zeminách

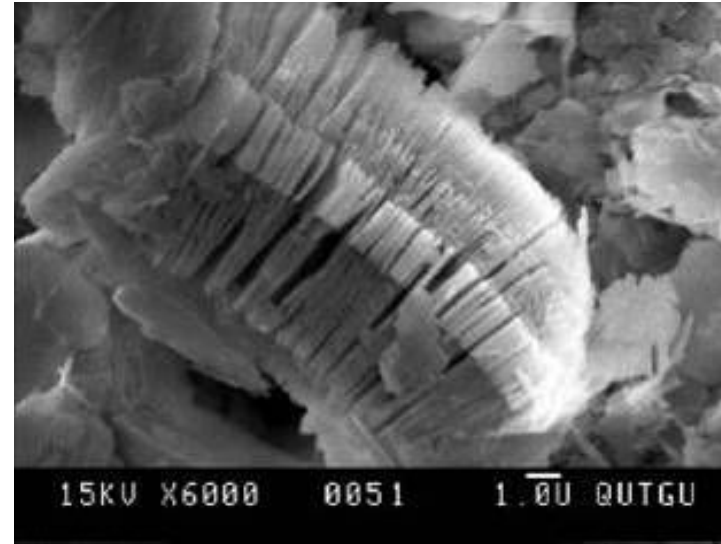
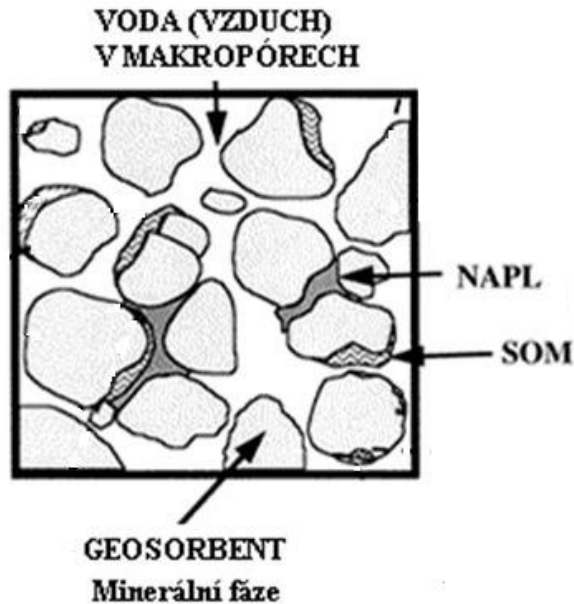


Foto by Dr. Mike Heath, Sheffield  
Hallam University

Absorpce do organické hmoty

Adsorpce na vlhké povrchy organické hmoty

Adsorpce na minerální povrchy

# Sorpce VOC v zeminách

## Organická hmota

- vliv na pohyb a retenci vody
- substrát pro organismy
- půdní pufr
- sorpční a chelatační vlastnost
- dominantní sorbent při vyšší vlhkosti matrice

## Minerální povrchy (jílové minerály)

- velký povrch
- schopnost vázat vodu
- schopnost iontové výměny
- sorpční vlastnosti
- dominantní sorbent u suchých zemin a v zeminách s obsahem org. hmoty nižší než 0,2 %.

# Sorpční koeficient $K_d$

**Karickhoff; 1984**

$$K_d = K_{OC} \cdot f_{OC}$$

**Streng, Peterson; 1989**

$$K_d = 10^{-2} \cdot K_{OC} \cdot (57,735 \cdot f_{OC} + 2,00 \cdot f_{OJ} + 0,4 \cdot f_{Prach} + 0,005 \cdot f_{Pisek})$$

**Nová alternativa – model OC-Al-Si; 2008**

$$K_d = 10^{-2} \cdot K_{OC} \cdot (57,735 \cdot f_{OC} + 2,80 \cdot f_{Al} + 0,005 \cdot f_{Si})$$



# Experimentální ověření OC-Al-Si

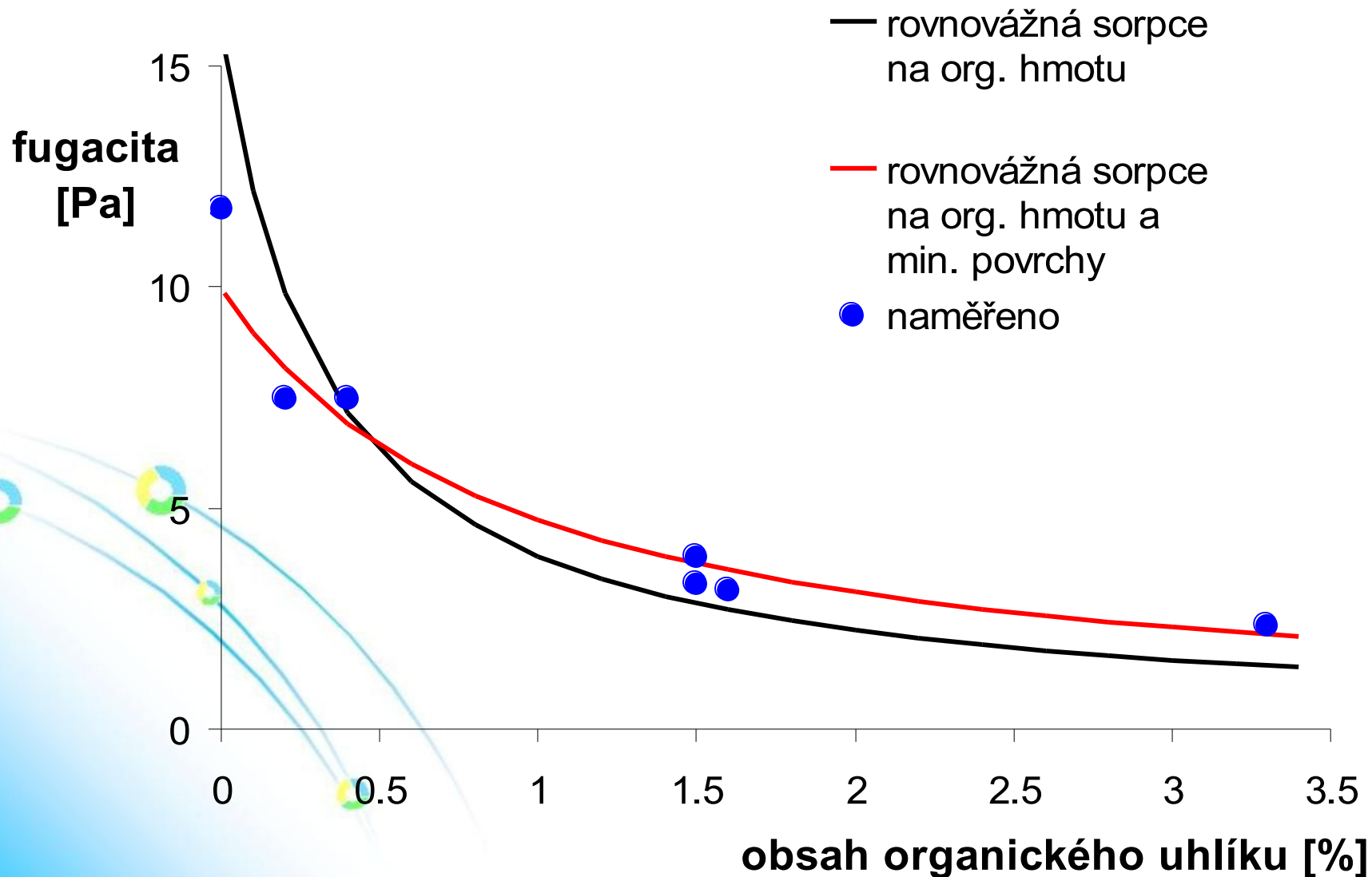


# Vlastnosti použitých vzorků zemín

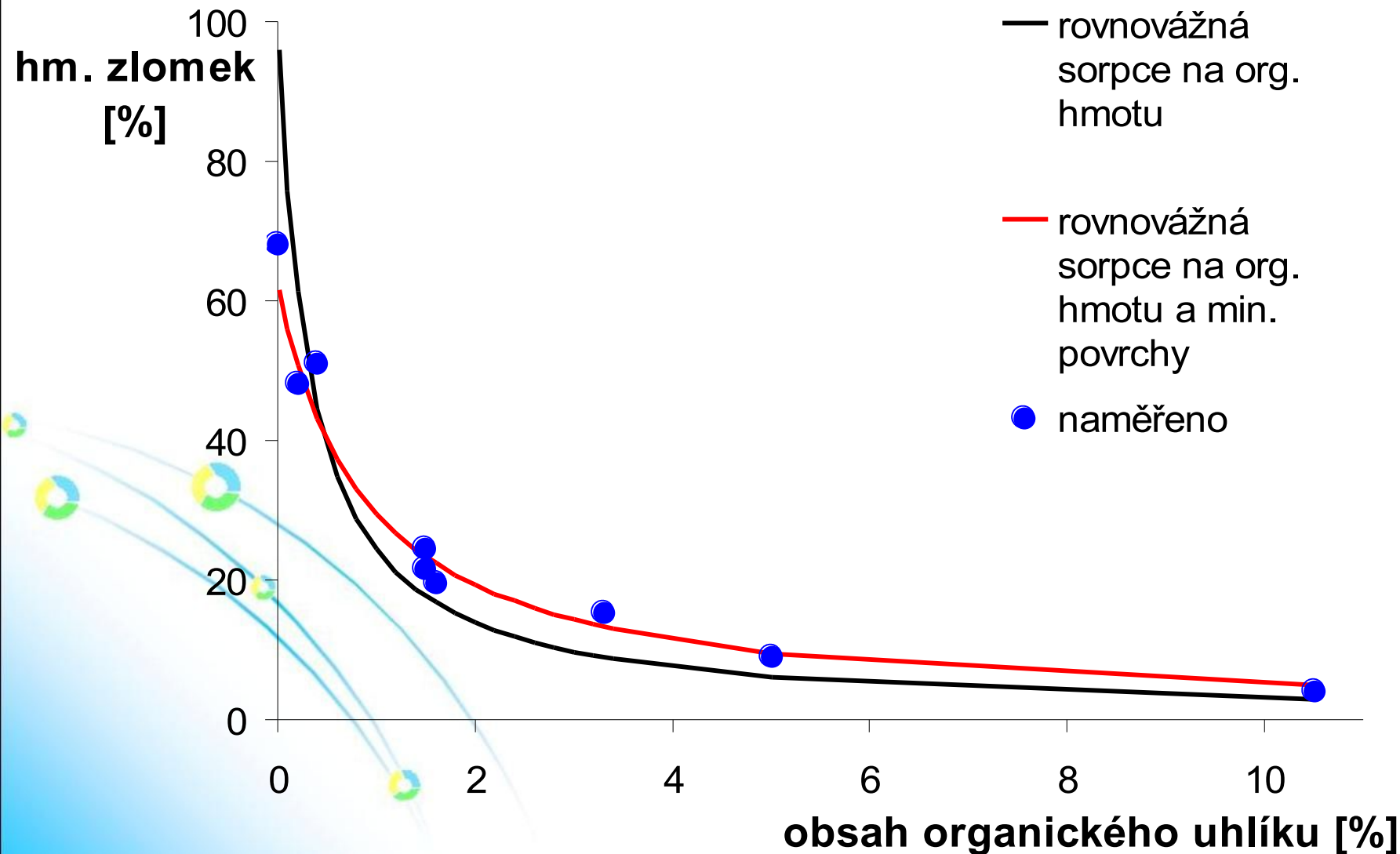
- 9 vzorků zemín s rozdílným obsahem OC
- vlhkost 1,2; 10; 20 hm. %
- 3 opakování

Vzorek		min	max
TOC	%	0,0	10,5
Pórovitost	%	37	63
Obsah Al	%	3,5	9,8
Obsah Si	%	31,5	37,8

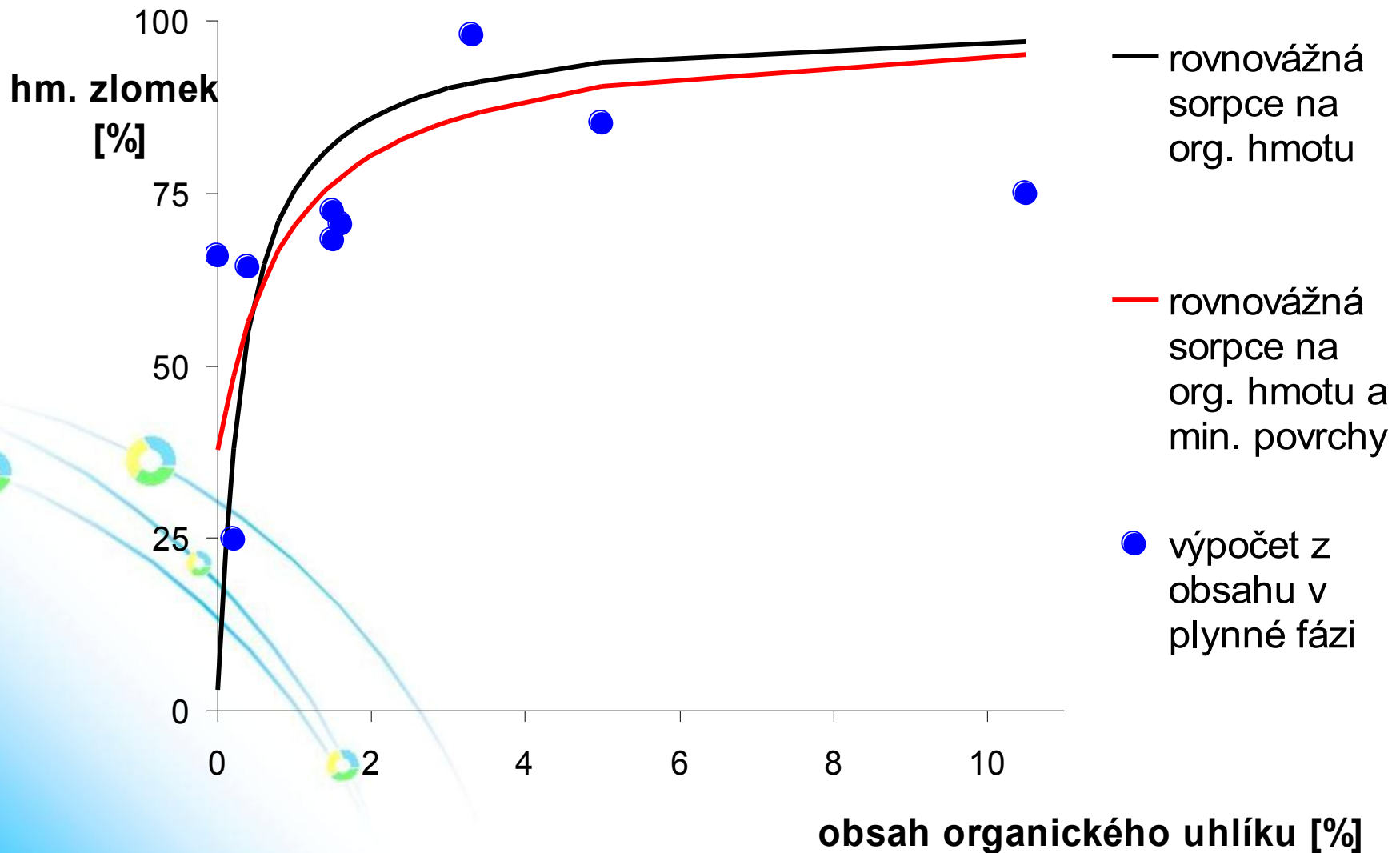
# Fugacita naměřená vs. rovnovážná ve vlhké zemině



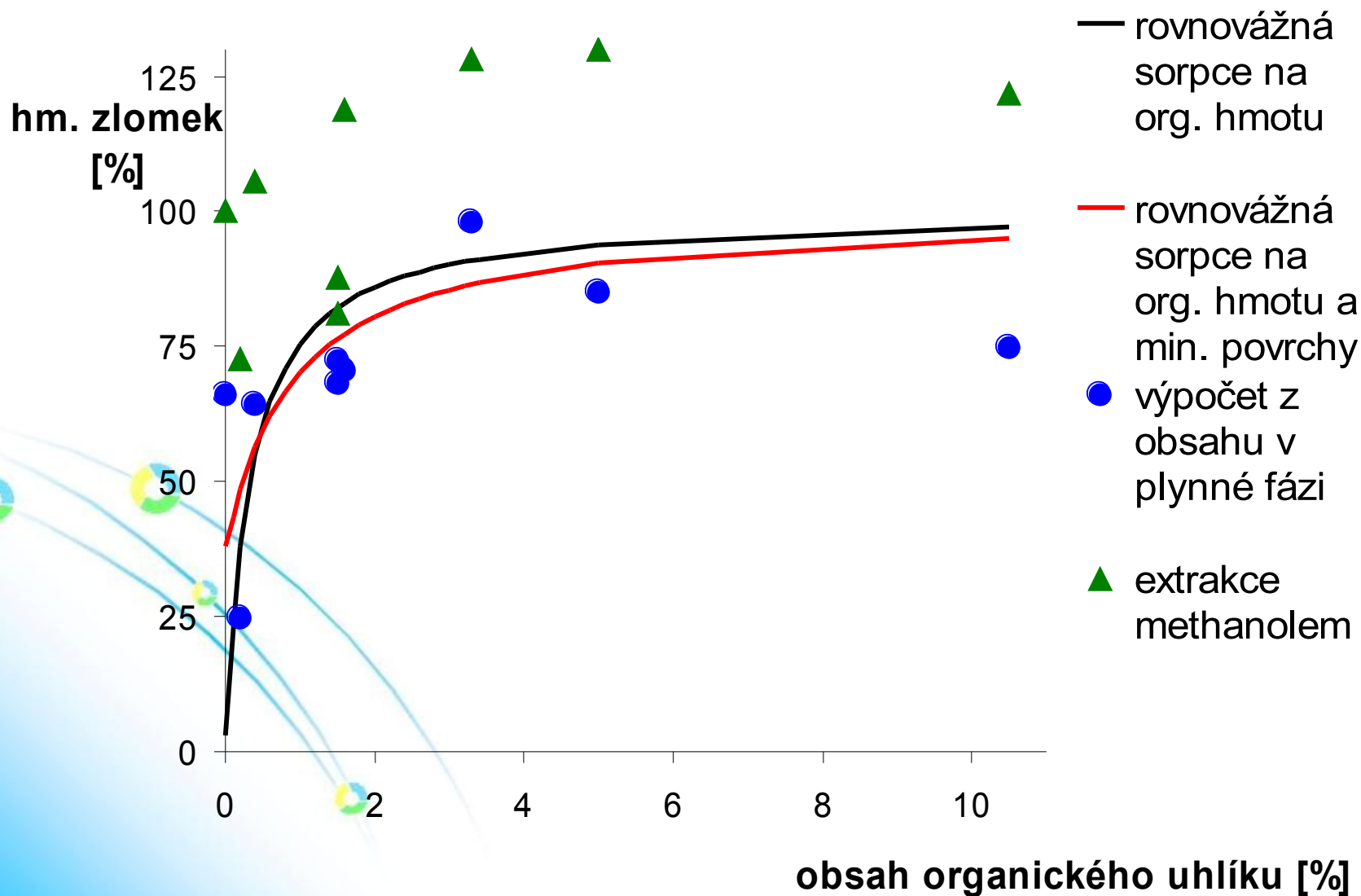
# Obsah VOC v plynné fázi v suché zemině



# Obsah VOC v pevné fázi v suché zemině



# Obsah VOC v pevné fázi v suché zemině



# Závěr

- Rozšíření sorpčních modelů o model OC-Al-Si, výhody:
  - menší množství vzorku pro charakterizaci zeminy
  - stanovení Al, Si XRF řeší problematické stanovení jílových podílů v zemině
- Aplikace modelu OC-Al-Si
  - Přepočet obsahu VOCs z  $\text{mg}\cdot\text{m}^{-3}$  v půdním vzduchu na  $\text{mg}\cdot\text{kg}_{\text{suš.}}^{-1}$
  - Snížení nákladů při průzkumu během sanace