

Bilag 8. Omregning af K_d til K_f GEUS: Jim Rasmussen

Bindingen bestemt som fordelingskoefficienten K_d . I forbindelse med simulering af udvaskning med MACRO modellen anvendes Freundlich funktionen til beskrivelse af bindingen:

I denne lineære udgave af Freundlich funktionen, er C_{aq} koncentrationen af pesticid i jordvæsken, C_s er koncentrationen af pesticid på jorden (den faste fase), K_f er Freundlich koefficienten og n_f er Freundlich eksponenten.

$$\log C_s = \log K_f + n_f * \log C_{aq}$$

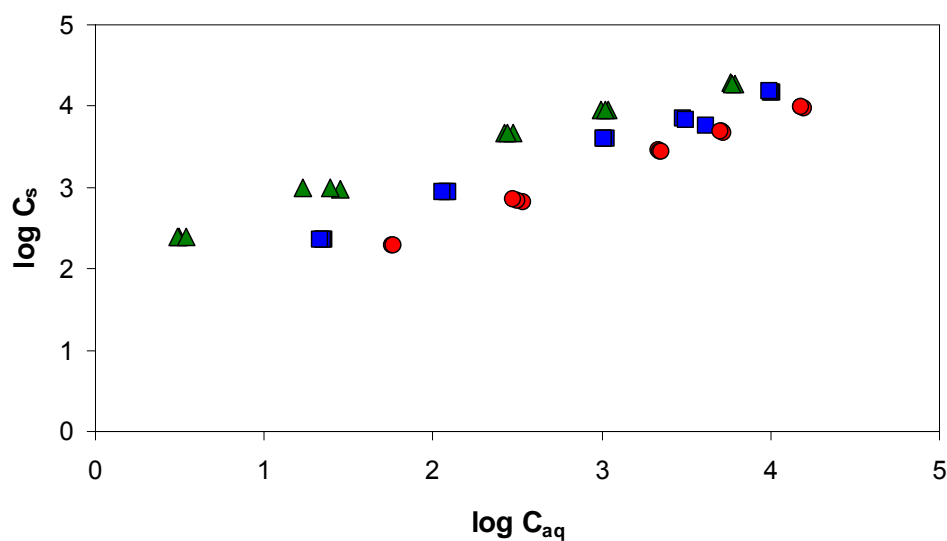
Freundlich koefficienten, K_f , beskriver (i analogi med K_d) fordelingen af pesticid mellem væskefasen og den faste fase, mens Freundlich eksponenten, n_f , beskriver mætningsgraden af binding ved stigende koncentration af pesticid. Ved n_f på 1 er K_f lig K_d , mens en n_f mindre end 1 betyder, at den relative binding falder med stigende pesticid koncentration. Jordens bindingssteder er altså mættede.

De omregnede K_d -værdier er anvendt i forbindelse MACRO simuleringerne og ved korrelation af øvrige jordegenskaber til binding.

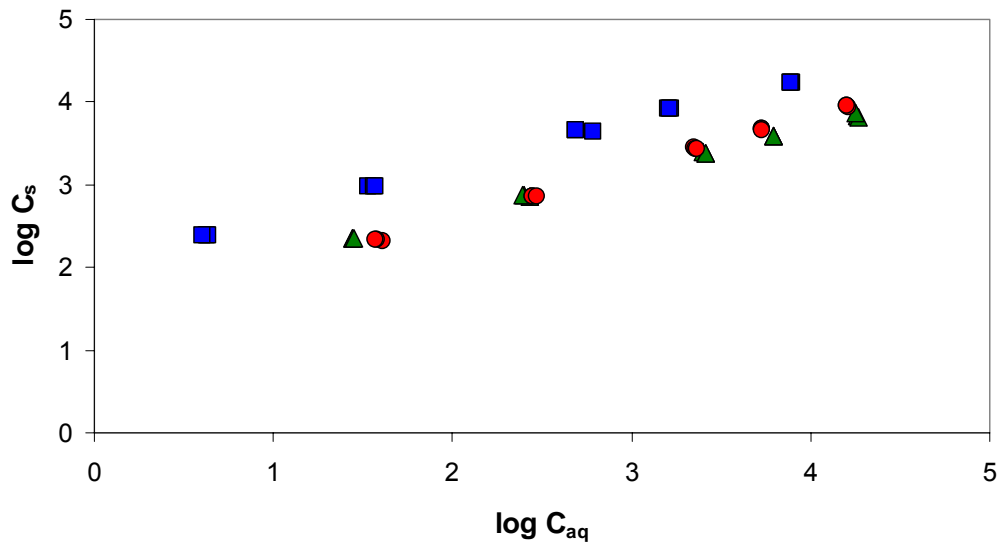
Isotemer bestemt for A- og C-horisont fra tre lokaliteter

Omregning af K_d for MTA, MTB, glyphosat og MCPA er foretaget i forhold til isotemer bestemt for prøver fra A- og C-horisonten på de tre lokaliteter. De tre lokaliteter repræsenterer landskabelementerne Yoldia flade (Ulsted), Hedeslette (Simmelkær) og Weischel moræne (Sjørup). Bestemmelsen af isotemerne er sket med 5 koncentrationer af pesticid efter samme forskrifter, som er fulgt ved bestemmelser af fordelingskoefficienten, K_d . Resultaterne er herunder illustreret for hvert af pesticiderne:

MTA, figurerne 8.1 og 8.2, samt tabel 8.1.



Figur 8.1. Lineær afbildning af isotemer for MTA i A-horisont fra Ulsted (blå ■), Simmelkær (grøn ▲) og Sjørup (rød ●).

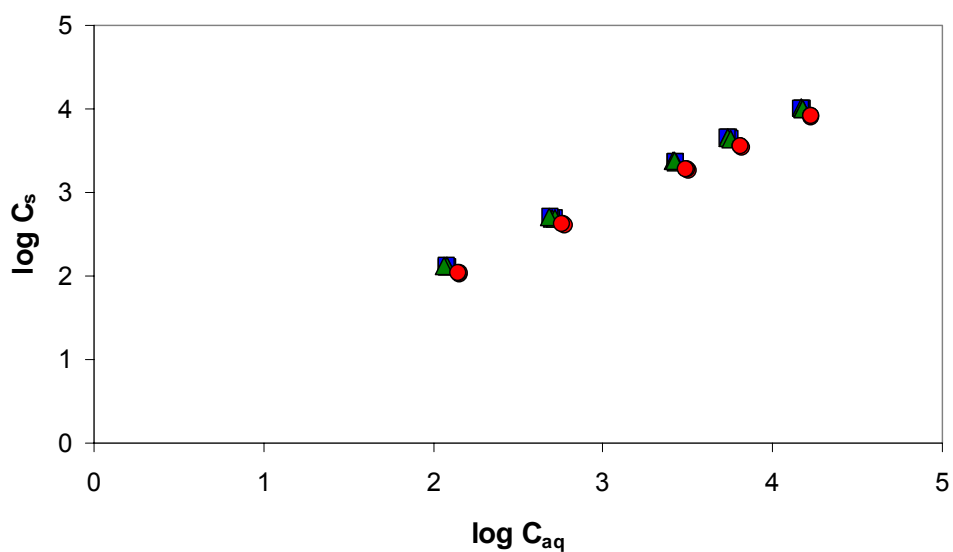


Figur 8.2. Lineære afbildning af isotermer for MTA i C-horisont fra Ulsted (blå ■), Simmelkær (grøn ▲) og Sjørup (rød ●).

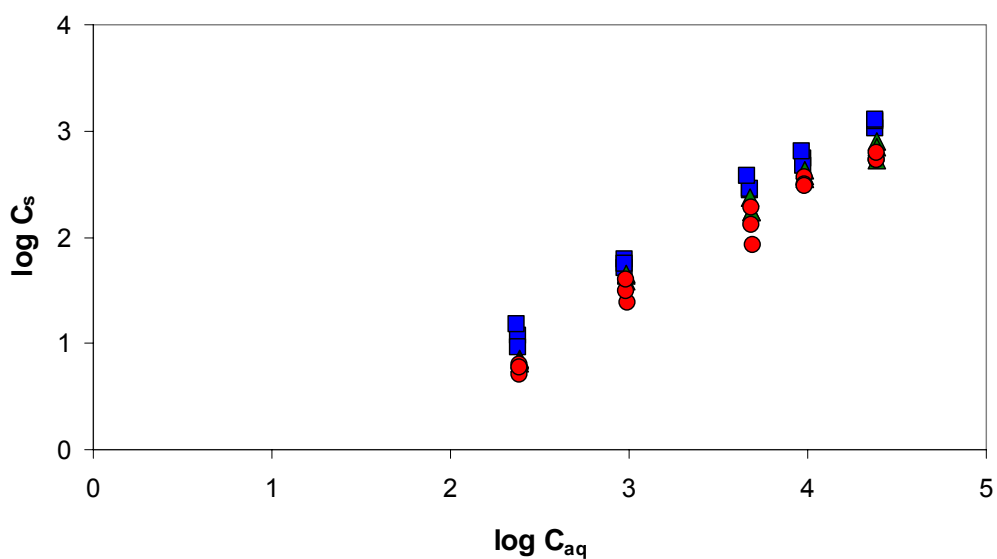
Tabel 8.1. Isothermer for MTA. Omregningsværdi for n_f er middelværdien for de tre lokaliteter.

Lokalitet	A-horisont			C-horisont		
	K_f	n_f	R^2	K_f	n_f	R^2
Ulsted	32,5	0,67	0,9909	118,6	0,57	0,9967
Simmelkær	147,4	0,58	0,9894	38,9	0,53	0,9993
Sjørup	11,6	0,70	0,9982	21,3	0,63	0,9995
<i>omregningsværdi</i>		<i>0,65</i>			<i>0,58</i>	

MTB, figurerne 8.3 og 8.4, samt tabel 8.2.



Figur 8.3. Lineær afbildning af isotermer for MTB i A-horisont fra Ulsted (blå ■), Simmelkær (grøn ▲) og Sjørup (rød ●).

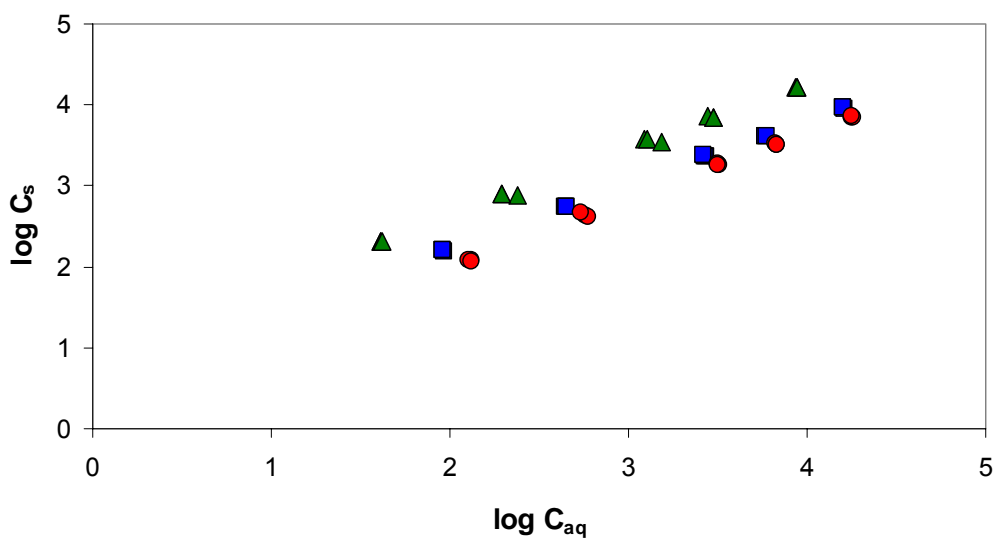


Figur 8.4. Lineær afbildning af isotermer for MTB i C-horisont fra Ulsted (blå ■), Simmelkær (grøn ▲) og Sjørup (rød ●).

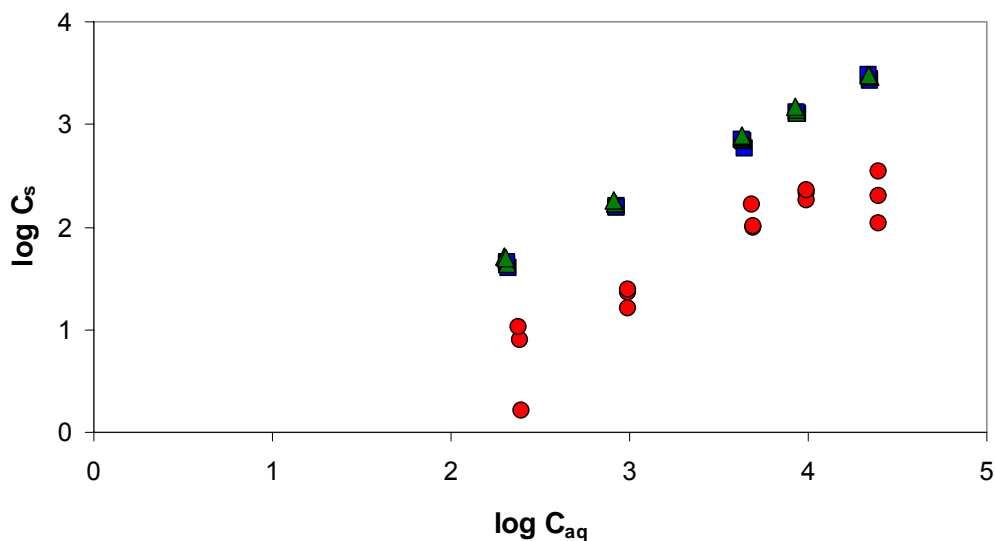
Tabel 8.2. Isothermer for MTB. Omregningsværdi for n_f er middelværdien for de tre lokaliteter.

Lokalitet	A-horisont			C-horisont		
	K_f	n_f	R^2	K_f	n_f	R^2
Ulsted	1,7	0,91	0,9993	0,05	1,01	0,9883
Simmelkær	1,8	0,90	0,9988	0,04	1,00	0,9808
Sjørup	1,3	0,90	0,9994	0,03	1,00	0,9781
omregningsværdi		0,90			1,00	

MCPA, figurerne 8.5 og 8.6, samt tabel 8.3.



Figur 8.5. Lineær afbildning af isotermer for MCPA i A-horisont fra Ulsted (blå ■), Simmelkær (grøn ▲) og Sjørup (rød ●).

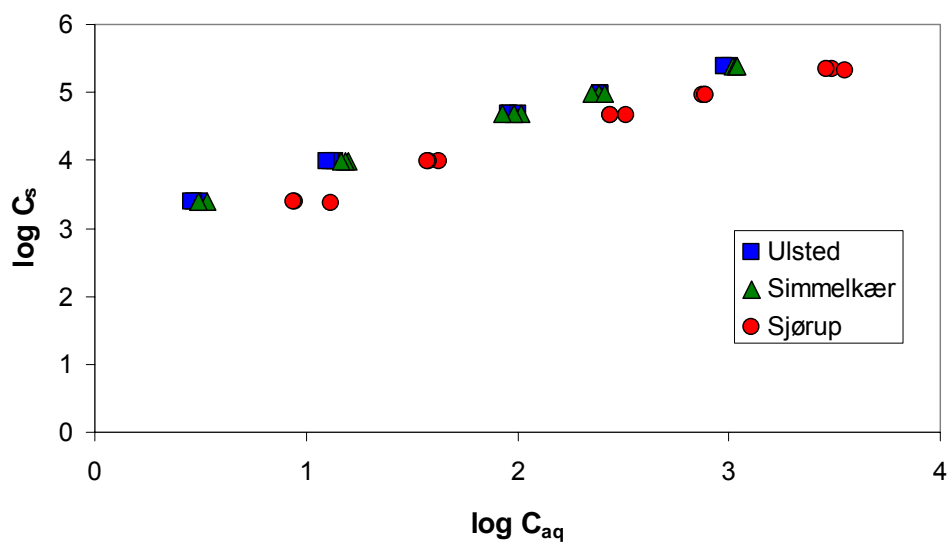


Figur 8.6. Lineær afbildning af isotermer for MCPA i C-horisont fra Ulsted (blå ■), Simmelkær (grøn ▲) og Sjørup (rød ●).

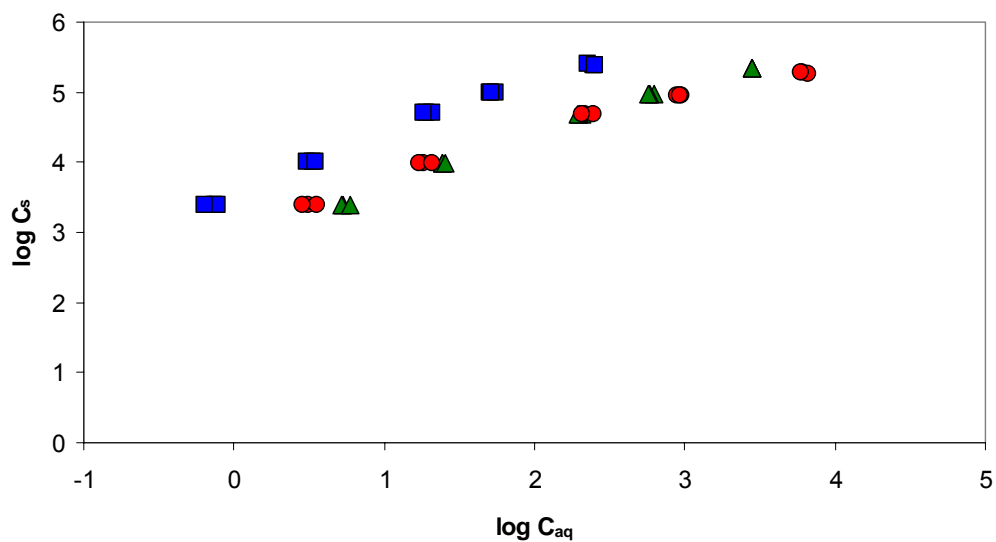
Tabel 8.3. Isothermer for MCPA. Omregningsværdi for n_f er middelværdien for de tre lokaliteter.

Lokalitet	A-horisont			C-horisont		
	K_f	N_f	R^2	K_f	n_f	R^2
Ulsted	4,6	0,79	0,9997	0,4	0,90	0,9983
Simmelkær	10,1	0,82	0,9977	0,5	0,88	0,9987
Sjørup	2,2	0,83	0,9987	0,1	0,85	0,8623
omregningsværdi		0,81			0,88	

Glyphosat, figurerne 8.7 og 8.8, samt tabel 8.4.



Figur 8.7. Lineær afbildning af isotermer for glyphosat i A-horisont fra Ulsted (blå ■), Simmelkær (grøn ▲) og Sjørup (rød ●).



Figur 8.8. Lineær afbildning af isotermer for glyphosat i C-horisont fra Ulsted (blå ■), Simmelkær (grøn ▲) og Sjørup (rød ●).

Tabel 8.4. Isotermer for glyphosat. Omregningsværdi for n_f er middelværdien for de tre lokaliteter.

Lokalitet	A-horisont			C-horisont		
	K_f	n_f	R^2	K_f	n_f	R^2
Ulsted	1170	0,79	0,9953	3740	0,80	0,9906
Simmelkær	1100	0,80	0,9928	860	0,72	0,9904
Sjørup	480	0,78	0,9883	1630	0,57	0,9805
<i>omregningsværdi</i>		<i>0,79</i>			<i>0,70</i>	

Opsamling

Generelt er der for alle fire stoffer tale om gode bestemmelser af Freundlich isotermerne. Freundlich eksponenterne er for MTB og MCPA stort set ens for de tre lokaliteter i hhv. A- og C-horisonterne. For glyphosat er Freundlich eksponenterne i A-horisonnten ens, mens eksponenterne i C-horisonterne er forskellige, hvilket betyder at omregningsværdien er usikkert bestemt. For MTA er der en vis forskel på de tre lokaliteter i både A- og C-horisonterne, hvilket medfører usikkerhed på omregningsværdierne.

Isotermerne for de fire stoffer bekræfter at MTA og glyphosat bindes meget stærkt til jorden, mens MCPA og MTB bindes mindre stærkt, hvor specielt bindingen i C-horisonnten er meget svag.