

# Zusammenfassung - Schadstoffe

**Ausbreitungsmodelle:** Atmosphärischen verschmutzungen können mit allen modellen berechnet werden; Schadstoffausbreitungen in aquatischen systemen bevorzugt mit dem PCM und oder Lagrange model; wohingegen schadstoffausbreitung in böden nur mit dem PCModell möglich ist:

**Gauss'sches modell** (Gaussian plum model): Die sich verbreitende abluft-fahne (je weiter weg vom emissionsort, desto mächtiger bei abnehmender konzentration) kann in ein koordinatensystem integriert werden; dabei spiegeln die achsen X die distanz zur emissionsquelle, und Y, Z die konzentrations-verteilungen im raum wieder.

Die anwendung der gauss'schen normalverteilung erfordert gewisse einschränkungen - ist daher nur anwendbar auf:

- freie ebene(n) (flach- und tiefland -ebene(n)), und
- konzentrationsverteilung bei völlig konstanten wind und temperatur-verhältnissen (thermik aufgrund der sonneneinstrahlung wirkt destabilisierend).

**Pasquill kategorie:** Miteinbeziehen der witterungsbedingungen ; dabei erfolgt eine unterteilung der witterungsspezifischen einflüsse in 6 sub-kategorien von extrem instabil bis mässig stabil; diese klassifizierung mit steigender kategorie-anzahl verursacht jedoch einen explosionsartigen anstieg des rechenaufwandes.

**Euler's grid model:** Der gesamte luftraum wird in ein 3-dimensionales gittersystem eingerastet, wobei eine jede zelle einem würfel entspricht. Dabei wird die schadstoff-konzentration unter berücksichtigung der strömung in jedem virtuellen würfel berechnet (bewegung/zeiteinheit) welche in summe wiederum die ganze verteilung widerspiegeln.

**Lagrange puffmodell:** Modell das sich auf den ausstoss von in sich abgeschlossenen wölkchen bezieht, bzw. sich auf die beobachtung von einzelteilchen beschränkt (die summe der einzelteile ergibt wiederum das ganze); vorteil dabei ist es unerheblich ob die windverhältnisse konstant oder variabel sind. Jedes *puff* (bis zu 9 puffs/h) stellt eine momentanaufnahme dar, welches über einen längeren zeitraum beobachtet wird. Zeitliche und räumliche änderungen können somit in die modellberechnung mit einfließen.

**Particle in a cell model** (PCM oder boxmodell): Ist eine verknüpfung der Lagrange- und Euler-modellen; dabei wird ein schadstoffteilchen (oder *puff*) pro zelle berechnet; aus dem bewegungsmuster dieser einzelteilchen errechnet sich dann die gesamtverteilung. Hierbei gilt wiederum, je feiner die maschenweite des gitters, desto höher der rechenaufwand.

**Particle model** (Monte Carlo methode): Wegverfolgung eines einzelteilchens wie unter Lagrange; die beobachtung mehrerer einzelbewegungen erlaubt die summarische interpolation des gesamten schadstoff-ausbreitungsverhalten. Als mindestanzahl der zu beobachtenden teilchen ist ein richtwert von  $1 \cdot E^6$  teilchenwege anzusehen. Ist daher sehr aufwendig nähert sich aber sehr gut den realwerten.

**Ausbreitungsmodell und dessen validierung:** Vergleich des experimentellen versuchs-fortgangs mit dem vom modell zu erwartenden ergebnisse wurde mit dem ETEX (*european tracer experiment*) durchgeführt; eine validierung solcher art bedarf gewisser voraussetzungen die dem modellcharakter sehr nahe kommen.

**Emissionsort:** Flachland ohne gebirgeeinfluss; z.b. NW-Frankreich mit beständiger W-wetterlage.

**Emissionsstoff:** Freigesetzter stoff darf nicht toxisch, nicht wasserlöslich und muss chemisch inert sein; z.b. PFC (per-fluor-carbon) wobei der hintergrund-wert eines solchen stoffes mit berücksichtigt werden muss (im falle von PCF ist background-level bei  $5 \cdot 7 \cdot E^{-15}$  mol/L luft).

**Messorte:** Eingrenzen des erfassungsbereiches auf eine zielzone; hier  $\leq 2000$ km vom emitenten.

**Messstationen:** Möglichst dichtes netz an stationen; z.b. im falle der EU, 168 stationen in 17 ländern östlich der emissionsquelle (setzt west-wetterlage voraus) und 3 fliegende mess-stationen; generell müssen dabei alle stationen ihre messprozeduren abstimmen (standardisieren).

**Messzeiten:** Messungen untergliedern sich in HMW (halbstunden-mittelwert); MW1 mittelwert pro h (stosszeitenmessung); MW8 mittelwert pro 8h (tagesrhythmen); TMW tages-mittelwert (wochenrhythmen); MMW monats-mittelwert; JMW jahres-mittelwert.

**Meteorologie:** Stabile und konstante witterungsbedingungen sind erforderlich; z.b. herbst (in der EU: 14<sup>ter</sup> und 23<sup>ter</sup> okt).

**Vergleichbarkeit:** Anhand der praktischen durchführung wurden 28 modelle untereinander verglichen.

- **Analyse des ETEX versuches:** Die zeitlichen und räumlichen ausbreitungsmuster ergaben erhebliche konzentrations-unterschiede, wobei die abweichungen zu den erwarteten resultaten fallweise identisch waren, jedoch mehrheitlich nicht den errechneten werten entsprachen (ein grossteil der messergebnisse waren zudem unbrauchbar). Im vergleich der modellvorhersagen bediente man sich der *figure of merit*, welcher als übereinstimmungs-index die brauchbarkeit eines modells widerspiegelt:

$$F_M = \frac{A_D}{A_\Sigma} \cdot 100 \quad [\%]$$

$A_D$ , deckungsfläche zw. model und realität [m<sup>2</sup>]  
 $A_\Sigma$ , totale emissionsfläche [m<sup>2</sup>]

Dabei zeigte sich dass der europaweite  $F_M$  index eine 35% und der lokale  $F_M$  eine 26%ige deckung erfuhr. Die relativ grossen abweichungen liegen in der meteorologie des eruopäischen kontinents begründet.

**Expositionsbeeinflussende faktoren:** Die art des nahrungserwerbs und dessen umsetzung beeinflussen den anreicherungsgrad in einem organismus; dabei hängt die aufnahmefähigkeit eines schadstoffes unter anderem von folgendem ab:

**Variabilität:** Der mensch als *compartment* weist eine hohe variabilität auf (hochgradige komplexität des menschlichen organismus und seine regelungsmechanismen); die variabilität beim kleinkind ist wesentlich höher.

**Morfologie:** Flechten nehmen aufgrund ihrer oberfläche und ihrer passiven resorptions-fähigkeit wesentlich mehr auf als höhere pflanzen die die fähigkeit zur selektion besitzen; die oberflächenstruktur von böden kann jedoch zu einer erhöhten schadstoff-aufnahme führen.

**Metabolismus:** Je höher die metabolisierungs-rate desto grösser die auf- bzw. abgabe von schadstoffen.

**Verhalten:** Das freiland-verhalten eines organismus im habitat bestimmt ebenso die schadstoff-aufnahme.

**Schadstoffe:** Stoffe die in geringen dosen schädlich auf die biosfäre einwirken werden als schadstoffe eingereicht

**Antropogene schadstoffe:** Vom mensch verursachte stoffe die in die atmosfäre freigesetzt werden.

- **CO:** Kohlen-monoxid; verkehrsbedingte emissionen fossilen ursprungs.
- **Halogene:** Cl, F, etc. bilden in wässriger lösung HCl, HF, etc; überwiegend aus der chlorchemie.
- **NH<sub>3</sub>:** Ammoniak; in der intensiv-tierhaltung.
- **NO<sub>x</sub>:** Stickoxide; verkehrsbedingte emissionen fossilen ursprungs.
- **VOC:** Volatile organic compounds; flüchtige organische verbindungen aus verschiedensten produktionsprozessen.
- **H<sub>2</sub>S:** Schwefel-wasserstoff; nebenprodukt des anaeroben stoffwechsel (fermentation).
- **O<sub>3</sub>:** Ozon; verkehrsbedingte emissionen als sekundäres reaktionsprodukt.
- **SO<sub>2</sub>:** Schwefel-dioxid; aus der verbrennung fossiler brennstoffe.
- **Staub:** Aus verbrennungsprozessen fossiler energieträger, aber auch biogene brennstoffe; bei der stahl-, zementherzeugung, im steinbruch, glas-, und keramikindustrie. Entstehung auch beim umlagern von schüttgut, strassen- und reifenabrieb, verwitterungsprozesse, winderosion, und im baugewerbe generell. Aerosole (fest), russ, rauch (partikelförmig) können durchaus toxisch auf den menschen einwirken (können auch als träger von carcinogenen dienen); dabei ist die inhalation der substanz das ausschlaggebende faktum; toxikologisch wirksam ist die inhalierte substanz durch dessen morfologischer struktur; man teilt diese folgendermassen ein:

**Grobstaub** (*coarse dust*): Partikelstaub mit einem durchmesser mit 2-100µm; (überwiegend unter einwirkung der gravitation).

**Feinstaub** (*fine dust; submicrometer particle*): Partikelstaub mit einem durchmesser mit 0.01 - 2µm.

**Ultra-feinstaub** (*ultra fine dust*): Partikelstaub mit durchmesser <10nm (dieselschmutz am auspuff-topf - ist hoch reaktiv; schliesst sich daher rasch zu einem grösseren komplex von rund 100nm zusammen); gehorcht im wesentlichen der molekularen diffusion.

**PM-Standard:** *Particle mass*-standard der EPA (*environmental protection agency*); PM<sub>10</sub>: Partikelmasse von >10µm; werden aufgrund der toxizität zunehmend weiter klassifiziert in PM<sub>2.5</sub>, PM<sub>1</sub>.

**Klimawirksame schadstoffe:** Gase denen treibhaus-wirksame eigenschaften zugesprochen werden.

- **FCKW:** Fluorchlor-kohlen-wasserstoffe; aus der lösungsmittel-, reinigungsmittel-, treibmittel- und kühlmittel-industrie;
- **CH<sub>4</sub>:** Methan; aus der tierhaltung, aus fermentations-prozessen, erdgas, kläranlagen, deponien.
- **CO<sub>2</sub>:** Kohlendioxid; aus der verbrennung fossiler brennstoffe;
- **N<sub>2</sub>O:** Distickoxid; aus biologischen umsetz-prozessen von N-haltigen substanz; aus der verbrennung fossiler brennstoffe; in der chemischen industrie, als treibmittel, aus kläranlagen.

**Toxikologisch wirksame Schadstoffe:** Toxisch relevante Stoffe wie Schwermetalle und Faserstoffe.

- **As:** Arsen; **Cd:** Cadmium; **Cr:** Chrom; **Hg:** Quecksilber; **Pb:** Blei; als Reinstoffe oder chemisch gebunden in Form eines Aerosols an dem der Wasserdampf kondensieren kann.
- **Asbest;** Chrysotyl-Krokytolith-Fasergemisch ist aufgrund seiner rein mechanischen Wirkungsweise auf das Lungengewebe toxisch; früher verwendet als Spritzasbest, feuerfeste Isolationen, etc.

**Schadstoff-Import / Export:** Die Unterscheidung zwischen hausgemachten und fremd-schadstoffen kann nur durch die Verknüpfung mit der Meteorologie erfolgen; in der EU per EMEP (*European Monitoring and Evaluation of Long Range Transmission of Air Pollution*). Unter Berücksichtigung der Witterungseinflüsse lässt sich eine eindeutige NW-Strömung feststellen die Schadstoffe aus diesen Emissionsländern Richtung SO verfrachtet.

**Emission:** Schadstoff-freisetzung in die Umwelt; diese kann anthropogen sein (Klimawirksame Stoffe, i.e. Treibhausgase, oder Toxikologische Substanzen), bzw. Phyto-genen Ursprungs sein (CH<sub>4</sub> Emission durch Reis-Anbau, durch Nadel- und Laubbäumen, durch krautige Vegetation; etc.)

**Immission:** Schadstoff-Import aus dem regionalen und globalen Umfeld in ein Depositionsgebiet; dabei unterteilt man in 3 verschiedene Untereinheiten:

- **Globale I.:** mit grossen Verweilzeiten; breiten sich entlang der PBL (*planetary boundary layer* der oberen Stratosphäre) aus.
- **Regional I.:** mit Ausbreitungszonen bis zu einigen 1000km; z.B. Dimension des Ozonlochs, und
- **Lokale I.:** mit Ausbreitungsteppichen von rund 100km; z.B. Saurer Regen.

**Schadstoff-ablagerungen:** Schadstoffe-verfrachtung bzw. Deposition über verschiedenste Verteilungsmechanismen.

- **Sorption:** Passive Aufnahme von Schadstoffen; z.B. Adsorption durch die Haut und Absorption durch die Lunge.
- **Egestion:** Ausscheidung von Schadstoffen; z.B. durch den Harn.
- **Ingestion:** Aktive (orale) Aufnahme von Schadstoffen; z.B. durch die Nahrung.

**Deposition:** Ablagerung von Schadstoffen an Oberflächen (Boden via Luft; bzw. Sediment via Wasser).

**Dispersion:** Ausbreitung des Schadstoffes in flüssigem oder gasförmigem Medium.

**Sink:** Zone der Schadstoff-ablagerung. Als Beispiel sei hier Chernobyl erwähnt; Sr-Emissionen des AKWs hat chemisch analoge Eigenschaften wie Ca<sup>2+</sup>; kann von Pflanzen nicht unterschieden werden und wird folglich wie Calcium resorbiert; daher ist es wichtig Schadstoff-ausbreitungen per Simulationen vorhersagbarer zu machen.

**Schadstoff-anreicherung im Ökosystem:** Um Schadstoff-transporte zu veranschaulichen (überwiegend per Luft und zum Teil per Wasserstrassen) teilt man eine strukturelle, ökologische Einheit ein (*compartment*); dabei wird angenommen dass diese Einheit homogen ist und nur einen *input* (R<sub>IN</sub>) bzw. *output* (R<sub>OUT</sub>) als Hauptstrom-flüsse besitzt; die Ablaufkinetik innerhalb dieses *compartments* muss

natürlich mit Berücksichtigt werden.

$$\beta = \frac{q}{m} = \frac{[\text{g des Stoffes}]}{[\text{kg Körpergewicht}]}$$

Aus Gründen der Berechenbarkeit setzt man Homogenität (näherung) des *compartments* voraus:  $dq/dt = R_{IN} - R_{OUT}$

$$\text{rate} = \frac{\text{menge}}{\text{zeit}} = \frac{q}{t} \quad [\text{g/s}]$$

$\beta$ , massen-konzentration	[-]
m, masse	[kg]
q, menge	[g]
R <sub>IN</sub> , eingangsrate	[g/s]
R <sub>OUT</sub> , ausgangsrate	[g/s]
q, menge	[g]
t, zeit	[s]

- **Steady state:** Der Gleichgewichts-zustand wenn  $dq/dt = 0$  ist; i.e.  $q = \text{konstant}$ .

$$R_{OUT} = k \cdot q \quad \text{oder} \quad R_{OUT} = R_{IN} \quad k, \text{ prop. konstante} \quad [1/s]$$

Je mehr Inhalt im *compartment* aufgenommen wurde (R<sub>IN</sub>), desto schneller die Abtransport-Rate (R<sub>OUT</sub>); diese ist daher proportional zur Menge (q).

- **Halbwerts-zeit:** Jene Zeit die vergeht bis die Ursprungs-konzentration auf die Hälfte abgesunken ist; Aufnahme und Abbau (bzw. Abgabe) des Schadstoffes sind durch R<sub>IN</sub> und R<sub>OUT</sub> begründet.

$$t_{1/2} = \ln(2)/k \quad [s] \quad k, \text{ zerfallskonstante} \quad [1/s]$$

**Bioakkumulation:** Anreicherung des Schadstoffes durch die Nahrungskette; wesentlich ist dabei die Dosis:

$$\text{dosis} = \frac{\text{menge des Stoffes}}{\text{Körpermasse}} = \frac{[\text{g des Stoffes}]}{[\text{kg Körpergewicht}]} \quad [\text{mg/kg KG}] = \text{ppm}; [\mu\text{m/kg KG}] = \text{ppb}$$

$$\text{dosisrate} = \text{dosis} \cdot \text{zeit} \quad [s] \quad \text{aufgenommene Dosis über die Zeit};$$

**Schadstoff-transport:** Transport von chemischen und radioaktiven stoffen die als schadstoffe angesehen werden und überwiegend aus industriellen bzw. verkehrsbedingten prozessen herrühren. Dabei ist dessen aggregatzustand von grosser bedeutung da sich ein gasförmiger schadstoff besser verteilt als ein flüssiger oder gar ein feststoff. Als transport-medium dienen überwiegend wasser (oberflächen und grundwasser), boden (nur bedingt, und wenn dann nur als lokale erscheinung), sowie luft (verteilung per wind und diffusion).

- **Ferntransport:** Schadstoff-transport überwiegend per luft-verfrachtung über weite strecken.
- **Nahtransport:** Transport von Schadstoffen via luft, wasser und boden - mehr oder weniger nah zur emmissionsstelle.

**Transportwege:** Schadstoff-verfrachtung unterliegt auch zwei wesentlichen faktoren:

- **Aggregatzustand:** Fase des stoffes (gasförmig, flüssig, fester schadstoff); hängt zum grossteil von der molekularen und oder turbulenten diffusion und zuweilen von der impaktion im atmosphärischen system ab.
- **Löslichkeit:** Die löslichkeit bestimmt erheblich das transportverhalten eines schadstoffes; dabei wirken molekulare bis turbulente diffusion bzw. sedimentation in aquatischen systemen.

**Aquatische schadstoff-ausbreitung:** Wechselwirkungen mit dem gewässerboden durch sedimentation, strömungsbedingungen, und thermokline beeinflussen das schadstoff-verteilungsmuster. Die turbulente diffusion spielt auch hier eine erhebliche rolle; in fluss-systemen (lotischen gewässern) kommt die molekulare diffusion aufgrund der hohen viskosität des wassers kaum zum tragen, wohingegen in ruhigen gewässern (lentischen gewässern) eine gewisse verteilung hierdurch gegeben ist. Die deposition am gewässerboden ist durch die fall-geschwindigkeit, indirekt daher von der schwerkraft begründet. Teilchegrössen von 10-100nm ( $\approx$  macromoleküldurchmesser) sind schwerkraft-unabhängig und obliegen daher nur der molekularen diffusion - sind aber dadurch erst über weite strecken verteilbar. Dabei muss zwischen seen, unterirdischen wasserreservoirs, flüss-systemen, bächen, grundwasser-strömungen, meeren, und küstennahen verfrachtung unterschieden werden. Mithilfe des GAU in Chernobyl konnte eine validierung einiger berechnungsmodelle am russischen strom Dnjepr über eine gesamtstrecke von 900km mit  $^{137}\text{Cs}$  und  $^{90}\text{Sr}$  gemacht werden. In EU erfolgten validierungsversuche am rhein durch den emissionseintrag der firma Hofmann-LaRoche.

**Grundwasser-schadstoff-ausbreitung:** Die art des grundwasser-leiters (porosität) und die vorherrschende grundwasser-strömung sind entscheidend über das ausbreitungsverhalten eines schadstoffes. Das unterirdische gewässersystem ist zudem in eine gesättigte zone (wässrige) und eine ungesättigte zone (kapillarwasser) eingeteilt. Je nach schadstoff-lokalität in diesen zonen beschleunigt bzw. verlangsamt sich das ausbreitungsverhalten. Weiters beeinflusst der spannungszustand des wasser das ausbreitungsverhalten zusätzlich; *freies* wasser kann sich je nach luftdruck-verhältnisse heben oder senken, wohingegen *gespanntes* wasser durch dicht umschlossene abgrenzungen keinerlei derartigen freiraum hat. Inerte schadstoffe lassen sich in aquatischen systemen gut verfolgen auch wenn eine teilweise sedimentation erfolgt. Mutationsfreudige substanzen sind hingegen weitaus schwieriger zu erfassen. So spielt der pH wert des bodenwassers eine grosse rolle und entscheidet darüber ob ein gebundener schadstoff (schwermetall) mobil wird oder nicht.

**Dimensionalität des schadstoff-transports** in gewässern: Dabei unterscheidet man folgende kriterien:

- **3D:** Schadstoff-ausbreitung im grundwasser erfolgt ohne bevorzugung in alle richtungen; kaum grundwasser-strömung; molekulare diffusion überwiegt.
- **2D:** Schadstoff-ausbreitung im grundwasser in überwiegend zwei dimensionen; z.b. schwache grundwasser-strömung.
- **1D:** Schadstoff-ausbreitung im grundwasser erfolgt überwiegend in eine vorzugsrichtung; überwiegend bei starker grundwasser-strömung.
- **0:** Schadstoff ist homogen im grundwasser-körper verteilt.

**Schadstoff-transport in seen:** Schadstoff-eintrag in seen kann *direkt* als regen oder *indirekt* als run-off erfolgen; letzterer ist stark von der niederschlags-menge, den vorherrschenden klimatischen bedingungen (trockener, gefrorener oder wassergesättigter boden) und der bodenbeschaffenheit (chemisch-fysikalische faktoren) abhängig. Radioaktive stoffe lassen sich leicht als tracer einsetzen; chemische tracer bedürfen aufgrund der absorptions-neigung im boden und im gewässer grössere masseneinträge um erfasst werden zu können.

Für seen gilt generell, dass sich schadstoffe nur mässig in pflanzlichen bzw. tierischen organismen anreichern, anders im sediment, wo der grossteil eines schadstoff-eintrages letztendlich auffindbar ist (analog der schadstoff-deposition im serbischen abschnitt der donau - vor der NATO-bombardierung). Sedimentation aufgrund der schwerkraft, diffusion, resuspension, und adsorption.

**Atmosphärische schadstoff-ausbreitung:** Die atmosphärische luftverschmutzung (ausbreitungsfähne eines schornstein-emittenten) ist entscheidend von der windrichtung und der dispersion abhängig. Im anglo-amerikanischen raum wurde daher oft der slogan des "*dissolution is the solution for pollution*" geprägt.

**Feste schadstoff-partikel:** Die partikelgrösse (aerodynamischer durchmesser) entscheidet darüber ob es rasch absinkt, hängenbleibt (trägeit = impaktion), durch regen ausgewaschen werden kann (rainout, washout), oder weiter transportiert wird (siehe auch fysikalische faktoren).

**Gasförmige schadstoffe:** Gase breiten sich aufgrund der thermischen eigenbewegung (brown'sche molekularbewegung) sehr gut über weite strecken aus (sub-micrometer partikel,  $<0.01\mu\text{m}$  entspricht molekül-durchmesser, verhalten sie sie gasförmige stoffe; - siehe auch fysikalische faktoren).

- **Klimatischer transport:** Grossräumige verfrachtung eines schadstoffes durch windkräfte.
- **Turbulente diffusion:** Topografische elemente (berge, städte, etc.) bewirken strömungs-turbulenzen die zu einer verstärkten verteilung führen.
- **Molekulare diffusion:** Eigendiffusion in der atmosphäre durch die brown'sche molekularbewegung.

**Ausbreitungsparameter:** Parameter die essentiell für das ausbreitungsverhalten von luftverfrachteten schadstoffen sind. Bewusster oder unbewusster schadstoff-eintrag wird in einem ökosystem durch verschiedene mechanismen bestimmt - kann zuweilen zu einer erheblichen ausdünnung bzw. anreicherung beitragen (ist bei partikulären schadstoffen von der partikelgrösse = aerodynamischen durchmesser, abhängig):

**Boden:** Löslichkeit eines schadstoffes ist auch durch den pH bestimmt; kann bei sauren böden zu einer erhöhten mobilität eines schadstoffes beitragen.

**Luft:** Klimatische faktoren, topografie und emissionshöhe beeinflussen das ausbreitungsverhalten von aerosolen (*airborne particles*):

- **Meteorologie:** Regen, wind, temperatur, etc. bestimmen die verteilung eines schadstoffes im ökosystem. Modelle die fluktuationen der windgeschwindigkeit und windrichtungen nicht berücksichtigen müssen mit einem mathematischen mittelwert angenähert werden; bzw. den Pasquill-kategorien entsprechen.

**Emissionshöhe:** Zusätzlich zur schornstein-höhe wirken thermik und windkräfte (atmosphärische konditionen), wobei es wesentlich ist wie hoch die schadstoff-wolke in die atmosphäre steigt. Dabei gilt, je heisser das abgass desto stärker dessen thermik (i.e. Brown'sche eigenbewegung), so steigt bei stärkeren winden diese wolke weniger hoch als an windstillen tagen.

- **Quellterm:** (Schadstoff-konzentration des emitenten) neben der ursprungskonzentration der schadstoff-wolke spielen die auswaschungs-effekte (*cloud depletion* = wolkenentleerung) durch regenwasser eine grosse rolle (*plum depletion*, wenn auswaschung gleich neben dem kamin erfolgt); ist durch den *cloud depletion factor* bestimmt; dieser gibt an, je weiter die wolke von der quelle entfernt ist, desto geringer ist die schadstoff-konzentration und verläuft nach einer exponential funktion:

$$\begin{array}{lll} \text{CDF} = Q_x/Q_0 = \lambda & [-] & Q_{x,0} \text{ quellstärken} \quad [\text{g}/\text{m}^3] \\ Q_x = Q_0 \cdot e^{-\lambda x} & & \lambda_x, \text{ CDF am ort } x \quad [-] \end{array}$$

- **Topografie / Orografie:** Bodenbeschaffenheit und inversions-wetterlagen können dazu führen dass sowohl diffuse (streu-) reflexion aber auch gerichtete (einfallswinkel = ausfallswinkel) der schadstoff-wolke erfährt. Zur vereinfachung setzt man glatte reflexionsschichten voraus.

**Wasser:** Gravitationsbedingte zu- oder abflüsse können lokal zu einer anreicherung bzw. auswaschung eines schadstoffes führen; auch hier sind klimatische faktoren zu berücksichtigen die das substrat aufweichen, gefrieren lassen etc.; ablagerungen von schadstoffen erfolgen meist im sediment von fliess- und standgewässern.

**Fysikalische faktoren die schadstoff-deposition beeinflussen:** In aquatischen als auch atmosphärischen bereichen der biosphäre gelten folgende gesetzmässigkeiten.

**Gravitation:** Das schwerkraftfeld der erde wirkt beschleunigend auf die bewegung; ruft dadurch einen verstärkten reibungseffekt hervor der sich in der fall-geschwindigkeit auswirkt; dabei findet eine asymptotische annäherung der sink-geschwindigkeit an einen maximalwert statt (*terminal sinking velocity*) welches als gleichgewichts-zustand definiert werden kann.

- **Reynold's Zahl:** Die tendenz eines fliessenden gases oder flüssigkeit sich von einer laminaren strömung in eine turbulente zu wandeln ist proportional zu dessen flussgeschwindigkeit und indirekt proportional zur dichte und viskosität des mediums. Reynoldszahlen von >1000 werden als schwellwert-index von laminar zu turbulent angesehen  
 $R_N = \rho \cdot v_{AV} \cdot 2 \cdot r / \eta$  [-]  
 $v_{AV}$ , durschn. flussgeschwindigkeit. [m/s]  
 $\rho$ , dichte des mediums [g/m<sup>3</sup>]  
 $r$ , radius des strömungskanals [m]
- **Stoke'sche Reibung:** Jene aufgrund von bewegung hervorgerufene reibungskräfte der in opposition stehenden kontaktflächen - im speziellen hier die fallreibung eines runden objektes in gasen oder flüssigkeiten  
 $F_{FS} = 6 \cdot \pi \cdot \eta \cdot r \cdot v$  [N]  
 $6 \cdot \pi$  (kugel), 6 · 3.14159 [-]  
 $\eta$ , viskositätskoeffizient [N·s/m<sup>2</sup>]  
 $r$ , radius [m]  
 $v$ , terminale sinkgeschwindigkeit [m/s]

**Trockene deposition:** Depositionsvermögen von eher kleinen teilchen die aufgrund von bewegungsvorgängen und der daraus resultierenden fysikalischen und chemischen kräfte- bzw. reaktions-abläufe deponiert werden (gilt nur für depositionen aus der luft):

- **Turbulente diffusion:** Deposition aufgrund impaktion hervorgerufen durch turbulente strömungsverhältnisse.
- **Molekulare diffusion:** Deposition aufgrund impaktion hervorgerufen durch die thermische eigenbewegung (Brown'sche molekularebewegung).
- **Impaktion:** Deposition durch die trägheit hervorgerufen durch das eigengewicht; e.g. hang-depositon.
- **Elektrostatische abscheidung:** Deposition durch elektrostatische anziehungskräfte hervorgerufen durch bewegung von geladenen teilchen.
- **Adsorption:** Deposition als ablagerungen bedingt durch die rauhheit der oberfläche; e.g. hängenbleiben.
- **Chemische reaktion:** Bindung mit anschliessender deposition aufgrund des massenzuwachs nach ablauf einer chemischen reaktion.

**Nasse deposition:** Deposition des schadstoffes durch niederschlag; wirkt ab aerodynamische partikel-durchmesser grösser 0.1µm (gilt nur für depositionen aus der luft):

- **Rainout / snowout:** Eine mit schadstoffen beladene wolke regnet sich aus; kann per rainout koeffizienten ( $\Psi$ ) näher bestimmt werden (analog dem *washout* koeffizient).
- **Washout:** Auswaschung erfolgt nach einer exponential-funktion, wobei der *washout*-koeffizient den auswaschungs-grad definiert:  
 $c_{(t)} = c_0 \cdot e^{-\lambda \cdot t}$   
 $c_0$ , ursprungskonzentration der schadstoff-wolke [g/m<sup>3</sup>]  
 $\lambda$ , *washout* koeffizient [1/s]  
 $t$ , zeit [s]

**Resuspension:** Ein schon deponierter schadstoff kann wieder in die atmosphäre eingetragen werden; z.b. deponierter flugstaub der durch wind wieder hochgewirbelt wird; resuspension lässt sich durch den empirische resuspensionsfaktor beschreiben werden:

$$R = c_L / s \quad [m]$$

- **Winderosion:** Mechanischer abrieb durch windkräfte (*airborne* transport); ist von der teilchen und bodeneigenschaft abhängig. Speziell teilchen <50µm im durchmesser neigen besonders volatil zu sein; dabei spielt die substratbeschaffenheit eine grosse rolle - trockenes statt feuchtes oder gar bewachsenes auflage-substrat beeinflusst die volatilität ebenso wie die topografie des geländes.
- **Saltation:** Bodenbezogener transport durch bodennahe luftströmungen ohne dass die schadstoff-teilchen wirklich abheben; tritt besonders in der teilchenklasse zwischen 50-1000µm statt.
- **Surface creeps** (kriechende oberflächen-verfrachtung): Local begrenzte bewegungsvorgänge die sehr starker strömungskräfte bedürfen (z.b. sturmböhen-verfrachtung).

**Sorption:** Aufnahme des Schadstoffes in den Boden; dabei unterscheidet man 2erlei Vorgänge:

- **Adsorption:** Oberflächen-bezogene Deposition; meist aufgrund elektrostatischer Anziehungskräfte.
- **Absorption:** Wirkliche Aufnahme in den Boden (durch kapillar-, van der Waal'sche Kräfte, aber auch durch chemische Bindungen (covalente, ionische, oder andere chem. Bindungskräfte).

$k_d$  - **Verteilungskoeffizient:** Eine empirische Grösse die Auskunft darüber gibt wie sich ein Schadstoff im Boden ausbreitet; ist für flüssige Beziehungen mit nachstehender Gleichgewichtseinstellung folgendermassen definiert:

$$k_d = \frac{m_s}{m_L} \quad [m^3/g] \quad \begin{array}{l} m_s, \text{ feste Stoffmenge / Gramm Boden} \quad [g/g] \\ m_L, \text{ flüssige Stoffmenge / L} \quad [g/m^3] \end{array}$$

$k_d$  lässt sich besonders gut bei radioaktiven Substanzen ermitteln die sich von der Hintergrundstrahlung abheben; ein wichtiges Kriterium ist die Gesamtoberfläche der Teilchen; dabei gilt, je kleiner das Teilchen desto grösser die Oberfläche relativ zu dessen Durchmesser; d.h. kleine Teilchen wie Ton können einen sehr hohen  $k_d$  aufweisen - wirken daher auch Ausbreitungshemmend (Analogie zur Deponie-Abdichtung).

**Präventivmassnahmen** (anhand eines radioaktiven Fallout Modells): Um vorbereitende Massnahmen ausarbeiten zu können müssen Ausbreitungsmodelle mit diversen Zusatzparametern gefüttert werden.

**Vorhersagbarkeit:** Neben dem Depositionsziel soll aber auch die Belastungsdauer über mehrere Wochen berechenbar sein um eventuelle Evakuierungs-Massnahmen rechtzeitig in die Wege leiten zu können. Weiters soll die Software auch darüber Auskunft geben welche Nahrungsmittel während der kritischen Phase bzw. auch danach für wie lange nicht verzehrt werden sollen.

- **Ingestionsbelastung:** Ernährungsgewohnheiten sollen durchaus mit in das Programm einfließen um zusätzliche Expositions-Belastungen mit zu berücksichtigen.
- **Inhalationsbelastung:** Aerosolbelastung soll ebenso durch Erfassung der charakteristischen Lungenkapazitäten möglich sein, um die Ganzkörper-Belastung durch inhalierte Schadstoffe berechnen zu können (z.B. per COSYMA Software-Paket).
- **Quervernetzung:** Schadstoff-Transfer von einem Organismus zum anderen bzw. vom Substrat zur Pflanze hängt wiederum vom Status der Wachstumsphase ab; ist im Jungstadium wesentlich erhöhter als im adulten Pflanzenstadium.
- **Regionalversorgung:** Lokales Einkaufsverhalten kann durchaus zu grösseren Expositions-Unterschieden führen; soll daher in der Software mit eingehen.
- **Viehhaltung:** Der bäuerliche Rhythmus kann in das Evaluierungs-Programm so eingebunden werden dass man rechtzeitig zwischen Frischfütterung und Stallhaltung umdisponieren kann um zusätzliche Expositionsfaktoren einzudämmen.
- **Wachstumsbeginn und Erntetermine:** Dienen der Sondierung um Belastungstoleranzen der Agrarproduktion erfassen zu können; z.B. Exposition während der Wachstumsphase ist bedenklicher als kurz vor der Erntezeit.