

UPTEC W 24044 Examensarbete 30 hp September 2024



Metoder för identifiering av sura sulfatjordar

En jämförelse av olika metoder och metallmobilitet

Fanny Holstein-Krag



Civilingenjörsprogrammet i miljö- och vattenteknik



UPPSALA UNIVERSITET



Abstract

Identification of acid sulfate soils – a comparison between different methods and the metal solubility

Fanny Holstein-Krag

Acid sulfate soils are environmentally harmful due to acidification and metal leaching, which necessitates reliable identification methods. The traditional incubation method typically takes 9 to 19 weeks and is therefore time-consuming. In this project, the incubation method was compared to two faster alternatives: the rapid oxidation test and the NAGpH-test. Both alternative methods use hydrogen peroxide as an oxidizing agent. Additionally, the metal solubility was investigated and subsequently geochemically modeled.

The incubation method, while taking 13 weeks to complete, provided reliable results for the identification of acid sulfate soils. The rapid oxidation test was a fast and simple method and could be useful for large infrastructure projects. However, the reliability of the method is strongly temperature dependent. The reliability decreased significantly at cold temperatures around 0°C when performed in the field. Therefore, cold conditions are a limitation for the method. Under controlled laboratory conditions, the rapid oxidation test proved to be reliable. The NAGpH method showed promising results, with the pH closely aligned with the incubation pH. The rapid oxidation test and the NAGpH-test can be used as identification methods for acid sulfate soils. However, the methods are not suitable in highly organic soils. The choice of the method used for identifying acid sulfate soils, should be guided by the specific objectives of the project as well as the characteristics of the soils.

When acid sulfate soil was oxidized, it led to an increase in the solubility of Cd, Co, Cr, Ni and Zn, while the leaching of As decreased. The metal solubility in oxidized samples corresponded well to the solubility in reduced samples at corresponding pH. The change in metal solubility is mainly explained by the decrease in pH, when the sulfides oxidize. The solubility of Co and Ni was modelled with Visual MINTEQ, and the predictions were fairly accurate for the examined acid sulfate soils.

Keywords: Acid sulfate soil, identification, incubation method, pH_{FOX}, NAGpH, metal solubility, leaching, geochemical modeling

Teknisk-naturvetenskapliga fakulteten Uppsala universitet, Utgivningsort Uppsala

Handledare: Rasmus Fältmarsch Ämnesgranskare: Dan Berggren Kleja

Examinator: Fritjof Fagerlund

ii

REFERAT

Metoder för identifiering av sura sulfatjordar – en jämförelse av olika metoder och metallmobilitet

Fanny Holstein-Krag

Sura sulfatjordar utgör ett miljöproblem globalt och i Sverige genom försurning och metallutlakning. Det finns därför ett behov av att tillförlitligt kunna identifiera dessa jordar. Traditionella inkubationsförsök är tidskrävande och tar 9–19 veckor. För att undersöka snabbare alternativ, har i detta projekt inkubationsförsök jämförts med två andra metoder: snabbtest och NAGpH-test. Dessa metoder använder väteperoxid som oxidationsmedel. Vidare undersöktes metallösligheten och utlakningen från sura sulfatjordar som också geokemiskt modellerades.

Inkubationsförsöket på laboratorium var tidskrävande (tog 13 veckor), men gav tillförlitliga resultat för att kunna identifiera sura sulfatjordar. Resultaten från snabbtest, visade att det är en snabb och enkel metod som kan vara användbar i infrastrukturprojekt där stora mängder jordmassor behöver hanteras. Det uppmärksammades att snabbtestet är starkt temperaturberoende och att vid kallare temperaturer cirka 0°C, försämrades dess tillförlitlighet signifikant. Snabbtestet utfört under kontrollerade laboratorieförhållanden gav dock tillförlitliga resultat. NAGpH-test utfördes på ett mindre urval prover än för inkubationsförsök och snabbtest. Resultaten var lovande med pH-värden som överensstämde väl med de från inkubationsförsöket. Snabbtest och NAGpH-test är inte lämpliga för identifiering av högorganiska jordar. Båda metoderna har potential att användas som identifieringsmetod för sura sulfatjordar i stället för inkubationsförsök, men val av metod styrs av ett projekts specifika syfte och förutsättningar.

Vid oxidation av sura sulfatjordar, ledde detta till en ökad metallöslighet och utlakning av metallerna Cd, Cr, Co, Ni och Zn, men en minskad utlakning av As. Metallösligheten i oxiderade prover överensstämde väl med metallösligheten i opåverkade (reducerade) prover vid motsvarande pH. pH bekräftades som den styrande faktorn för metallösligheten, till följd av sulfidoxidationen. Metallösligheten av Co och Ni simulerades med Visual MINTEQ och för sura sulfatjordar kunde modellen väl beskriva processerna som styr metallösligheten.

Nyckelord: Sur sulfatjord, sulfidjord, SSJ, identifiering, inkubationsförsök, pH_{FOX}, NAGpH, metallöslighet, geokemisk modellering

Institutionen för mark och miljö, Sveriges Lantbruksuniversitet Lennart Hjelms väg 9, Box 7014, SE-750 07 Uppsala

FÖRORD

Detta examensarbete har genomförts som en del i ett större utvecklingsprojekt inom Svenska Geotekniska Föreningen (SGF), på uppdrag av Atrax Energi & Miljö AB och Sveriges lantbruksuniversitet. Finansiärer för projektet var Naturvårdsverket, Svenska Byggbranschens Utvecklingsfond (SBUF) och SGF. Omfattningen var 30 högskolepoäng och det var den avslutande delen på civilingenjörsprogrammet i miljö- och vattenteknik vid Uppsala universitet och Sveriges lantbruksuniversitet. Handledare för examensarbetet var Rasmus Fältmarsch på Atrax Energi & Miljö AB och ämnesgranskare var Dan Berggren Kleja vid institutionen för mark och miljö på Sveriges Lantbruksuniversitet.

Jag vill rikta ett stort tack till Rasmus för din expertis, stöttning och engagemang genom hela arbetets gång. Jag vill även tacka Dan för dina värdefulla synpunkter och vägledning. Stort tack till Jon Petter Gustafsson vid institutionen för mark och miljö, för din tid och hjälp med laborationer och modellering. Ett till tack till Jarkko Linnamaa på Atrax för att du uthärdade kyliga dagar i fält. Jag vill också tacka Alexandra Nyman vid Linnéuniversitetet för tillgång till data för urval av provtagningsplatser. Slutligen vill jag tacka Anton Boman på GTK för din hjälp och att du kom med behövlig input angående klassificeringen av sura sulfatjordar.

Fanny Holstein-Krag Uppsala, september 2024

Copyright © Fanny Holstein-Krag och Institutionen för mark- och miljö, Sveriges Lantbruksuniversitet UPTEC W 24044, ISSN 1401-5765 Digitalt publicerad i DiVA, 2024, genom institutionen för geovetenskaper, Uppsala universitet. (http://www.diva-portal.org/)

POPULÄRVETENSKAPLIG SAMMANFATTNING

Runt om i världen, inklusive Sverige, finns det olika jordar som är skadliga för miljön. En sådan jord är sura sulfatjordar. Dessa har bildats naturligt sedan den senaste istiden och är ofarliga så länge de inte störs. Problem kan dock uppstå när exempelvis nya vägar och broar ska byggas och dessa behöver grävas upp eller när marker dräneras. När sura sulfatjordar kommer i kontakt med luften reagerar specifika mineraler så kallade järnsulfider som innehåller järn och svavel, med syret och bildar svavelsyra. Denna syra gör att marken och vattnet blir surt, vilket påverkar omgivningen. Försurningen kan orsaka allvarliga problem för miljön. Metaller som annars hålls kvar i marken kan börja röra på sig och ansamlas i farligt höga halter. Då kan fisk i vattendragen ta skada och dö, även byggmaterial som betong kan börja lösas upp genom korrosion. Sura sulfatjordar förekommer längs med alla kuster i Sverige och stöts på allt oftare. För att förhindra att miljön skadas av att dessa jordar störs, är det viktigt att kunna identifiera dessa så att de kan hanteras på ett säkert sätt.

Vanligtvis har en metod som kallas för inkubationsförsök använts internationellt och i Sverige för att identifiera sura sulfatjordar. Detta är en tillförlitlig metod för identifiering, men en stor nackdel är att den kan ta upp till 19 veckor att genomföra. Metoden går ut på att man efterliknar naturliga förhållanden och låter jordprover få komma i kontakt med syre och får reagera under en längre tid. Denna reaktion kallas för oxidation. Efter det mäts pH som är ett mått på surheten i jorden. I samhället vi lever i idag, är det oftast inte möjligt att vänta så länge på ett resultat. Därför har jag i detta projekt jämfört den långsamma metoden, inkubationsförsök, med två snabbare metoder. Dessa kallas för snabbtest och NAGpH-test.

I stället för att låta jordprover reagera med syre långsamt, används ett ämne kallat väteperoxid. Väteperoxiden gör samma sak som syret men mer aggressivt. Därför går reaktionen snabbare. Sedan mäts pH precis som för inkubationsförsöket. Snabbtestet utfördes både ute i fält och inne i laboratorium. Metoden visade sig vara känslig för temperaturen ute i fält och vid 0°C, bromsades reaktionen, vilket gav otillförlitliga resultat. Däremot fungerade metoden i labbmiljö, då jordprover tillförlitligt kunde identifieras som sur sulfatjord eller inte. Den andra metoden NAGpH gav lovande resultat för identifiering och dessa stämde väl överens med motsvarande pH i inkubationsförsök. Resultaten för jämförelsen visade därför att alla tre metoder kunde identifiera sura sulfatjordar. Valet av metod bör dock baseras på i vilket syfte som identifieringen ska utföras. Om stora områden med jord behöver identifieras kan snabbtestet vara fördelaktigt om det tas till hänsyn för temperaturbegränsningen.

Utöver att identifiera sura sulfatjordar, undersöktes det också mängden metall som frigörs från marken vid oxidation. Denna frigörelse av metaller från marken till grund- och ytvatten kallas för utlakning, då metallerna läcker ut och transporteras bort. Denna process styrs av hur rörlig metallen blir, vilket i sin tur påverkas av surheten. När metaller lakas ut från jorden är de som giftigast för växter och djur. De metallerna som undersöktes var arsenik, kadmium, kobolt, krom, nickel och zink. När jordprover av sura sulfatjordar fick oxidera, var metallerna mycket mer lösliga än i prover som inte hade oxiderat och var opåverkade. Resultaten visade därför att metallerna kadmium, kobolt, krom, nickel och zink lakades ut i betydligt högre halter än för opåverkade prover. Detta jämfördes också med jord som inte var sur sulfatjord och utlakningen från dessa jordar var mycket mindre. Att högre halter frigjordes berodde på försurningen som uppstår när järnsulfiderna oxiderades. En surare miljö gör att jorden inte kan hålla fast metallerna lika väl. Det är dock tvärtom för just arsenik som blir mer löslig vid mer basiska förhållanden. Det som bestämmer hur metaller binds till marken eller frigörs, påverkas främst av mängd organiskt material, hur mycket lera jorden innehåller och vad för olika mineral den består av.

I projektet undersöktes det också om lösligheten av metallerna kobolt och nickel kunde förutspås med en modell i Visual MINTEQ. Modellen kunde simulera metallösligheten och fånga de övergripande processerna som sker i marken för sura sulfatjordar. Däremot när samma sak gjordes för referensjorden som inte var sur sulfatjord, lyckades inte lösligheten förutsägas lika väl. Vidare kunde den därför inte beskriva hur metallerna hålls fast i marken i en större utsträckning.

ORDLISTA

CEC	Katjonbyteskapacitet (eng. cation exchange capacity)
DOC	Löst organiskt kol (eng. dissolved organic carbon)
Ej SSJ	Jord som inte klassificeras som sura sulfatjordar
Fh-FCD	Adsorptionsmodell för järn(hydr)oxider i Visual MINTEQ
GF	Glödförlust (eng. LOI)
Hydr(oxider)	Hydroxider och oxider
Inkubation	I denna rapport, jordprover som får oxidera med syret i luften i laboratorium
Inkubationsförsök	I denna rapport, identifieringsmetod för sura sulfatjordar med syre
NAG	Net Acid Generation
NAGpH	Uppmätt pH efter NAGpH-test
NAGpH-test	I denna rapport, identifieringsmetod för sura sulfatjordar med väteperoxid (15 %)
Oxiderat prov	Prov som oxiderats i nio veckor i inkubationsförsök
Para-SSJ	Underkategori av sura sulfatjordar, som är mindre försurande än sura sulfatjordar
$pH_{F\ddot{A}LT}$	Uppmätt pH vid provtagning i fält
pH _{FOX}	Uppmätt pH efter snabbtest
pH _{INK}	Uppmätt pH efter avslutat inkubationsförsök, i denna rapport efter 13 veckor
Opåverkat prov	Prov som var opåverkat (reducerat) och ej oxiderat i inkubationsförsök
RMSE	Root mean square error
SHM	Stockholm Humic Model, en organisk komplexmodell i Visual MINTEQ
Snabbtest	I denna rapport, identifieringsmetod för sura sulfatjordar med väteperoxid (30 %)
Specialprov	Prover som valts ut för vidare kemiska analyser
SSJ	Sura sulfatjordar, ett samlingsnamn för både aktiv sur sulfatjord (sulfatjord) och potentiellt sur sulfatjord (hypersulfidjord)
TOC	Totalt organiskt kol (eng. total organic carbon)
TS	Torrsubstans
XRPD	X-ray Powder Diffraction

INNEHÅLLSFÖRTECKNING

1 INLEDNING	
1.1 SYFTE OCH FRÅGESTÄLLNINGAR	
2 BAKGRUND	
2.1 SURA SULFATJORDAR	
2.1.1 Förekomst och bildning	
2.1.2 Mineralogi	
2.1.3 Klassificering	
2.2 ÖVERSIKT AV BEFINTLIGA KARAKTERISERINGSMETODER	6
2.2.1 Svavelhalt	6
2.2.2 Inkubationsförsök	6
2.2.3 Snabbtest	6
2.2.4 NAGpH-test	6
2.2.5 Trafikverkets bedömning	6
2.3 MILJÖPROBLEM	7
2.4 METALLÖSLIGHET	7
2.4.1 Processer som påverkar metallöslighet	7
2.4.1 Kadmium (Cd), Kobolt (Co), Nickel (Ni) och Zink (Zn)	
2.4.2 Arsenik (As) och Krom (Cr)	
3 METODER OCH MATERIAL	9
3.1 PROVTAGNING I FÄLT	9
3.2 ANALYSER	
3.2.1 Kemiska analyser	
3.2.2 Specialprover	
3.2.3 XRPD-analys	
3.2.4 Kornstorleksfördelning	
3.3 IDENTIFIERINGSMETODER	
3.3.1 Inkubationsförsök	
3.3.2 Snabbtest	
3.3.3 NAGpH-test	
3.3.4 Korrelationsanalys av identifieringsmetoderna	
3.4 KLASSIFICERING AV SUR SULFATJORD	
3.5 LAKTESTER OCH METALLMOBILITET	
3.5.1 Extraktion med 0,43 M HNO3	
3.5.2 pH-beroende lakbarhet	

3.5.3 Extraktion med 0,001 M CaCl2 av oxiderade prover	
3.6 MODELLERING I VISUAL MINTEQ	
3.6.1 Modellparametrar	
3.6.2 Modellvalidering	
4 RESULTAT	
4.1 PROVTAGNING I FÄLT	
4.2 KEMISK KARAKTÄRISERING AV SSJ01, SSJ03 OCH REF01	
4.2.1 Kemiska analyser	
4.2.2 Specialprover	
4.2.3 XRPD-analys	
4.3 IDENTIFIERINGSMETODER	
4.3.1 Inkubationsförsök	
4.3.2 Snabbtest	
4.3.3 NAGpH-test	
4.3.4 Jämförelse av resultat för identifieringsmetoderna	
4.4 KLASSIFICERING	
4.5 LAKTESTER OCH METALLMOBILITET	
4.5.1 Geokemiskt aktiv fraktion	
4.5.2 Utlakad fraktion	
4.5.3 Jämförelse av opåverkade och oxiderade specialprover	
4.4 MODELLERING I VISUAL MINTEQ	
4.4.1 Katjonbyteskapacitet	
4.4.2 Kobolt och nickel	
5 DISKUSSION	
5.1 PROVTAGNING I FÄLT	
5.2 KEMISKA ANALYSER	
5.2.1 Totalhalter	
5.2.2 Svavelhalt	
5.2.3 TOC	
5.2.3 XRPD-analys	
5.3 IDENTIFIERINGSMETODER	
5.3.1 Inkubationsförsök	
5.3.2 Snabbtest	
5.3.3 NAGpH-test	
5.3.4 Jämförelse av identifieringsmetoder	

5.4 KLASSIFICERING AV SULFIDJORD
5.5 METALLMOBILITET
5.5.1 Jämförelse av metallöslighet mellan opåverkat och oxiderat prov
5.6 MODELLERING I VISUAL MINTEQ
5.6.1 Katjonbyteskapacitet
5.6.2 Kobolt och nickel
6 SLUTSATSER
REFERENSER
BILAGOR
BILAGA A – TOTALHALTER I JORD
BILAGA B –KLASSIFICERING AV JORDPROFILER
BILAGA C – DATA FÖR METALLMOBILITET
Bilaga C.1 – Analyssvar från extraktion med 0,43 M HNO ₃
Bilaga C.2 – Analyssvar från pH-beroende laktest
Bilaga C.3 – Analyssvar från extraktion med 0,001 M CaCl ₂ av oxiderade prover
BILAGA D – Katjonbyteskapacitet

1 INLEDNING

Sura sulfatjordar (SSJ) utgör ett globalt miljöproblem. Dessa jordar innehåller järnsulfider som vid oxidation bildar svavelsyra (Dent & Pons 1995). Detta leder till en kraftig pH-sänkning och försurning av både mark och grundvatten (Sohlenius & Öborn 2004; Mattbäck et al. 2022). Följaktligen mobiliseras miljöfarliga metaller, som vid stor vattenföring, lakas ut i koncentrationer som påverkar miljön negativt (Åström & Corin 2000; Fältmarsch et al. 2008). Påföljderna blir försämrad vattenkvalitet och skador på akvatiska ekosystem (Toivonen et al. 2020) inklusive fiskdöd (Erixon 2009) samt ökad risk för korrosion av infrastruktur (Pousette 2010). Detta är omfattande negativa miljöeffekter kopplade till sura sulfatjordar och de beskrivs därför som "the nastiest soils in the world" (Dent & Pons 1995).

Sura sulfatjordar är ett samlingsnamn som innefattar aktiv sur sulfatjord (direkt försurande) och potentiellt sur sulfatjord (Boman et al. 2023). Förekomsten av sura sulfatjordar i världen uppskattas till cirka 50 miljoner ha (Michael et al. 2017). I Sverige förekommer sur sulfatjord längs hela östkusten, från norr till söder, samt i Mälardalen och även på västkusten (SGU 2024; Nyman et al. 2023). Utbredningen i Sverige på jordbruksmark, har uppskattats till 140 000 ha (Öborn 1994). Sura sulfatjordar utgör därmed en betydande miljörisk i stora delar av landet. Jordarna förekommer naturligt och har bildats från sulfidrika sediment som har avsatts under den senaste istiden (Becher et al. 2019; Nyman et al. 2023). De negativa miljöeffekterna uppstår när jorden kommer i kontakt med syre och sulfiderna oxiderar. Detta sker vanligtvis vid markavvattning eller uppgrävning av jorden vid olika infrastrukturprojekt (Boman et al. 2023). Det är därför väsentligt att sura sulfatjordar effektivt kan identifieras. Fram tills nyligen har forskning om sur sulfatjord varit mer omfattande i länder som Finland och Australien. Där har utförlig kartläggning, utveckling av identifieringsmetoder samt hållbar hantering prioriterats (Edén et al. 2023; Miljöministeriet 2022; Sullivan et al. 2018). Länge var kartläggningen i Sverige begränsad till Norrlandskusten (SGU 2024), men under de senaste åren har forskningen i Sverige ökat. Detta inkluderar mer övergripande kartläggning (Nyman et al. 2023) och utredning om hantering av dessa jordar (Trafikverket 2023).

Den metod som främst används och rekommenderas för undersökning av sura sulfatjordar är inkubationsförsök. Metoden är enkel att genomföra, men också tidskrävande då jorden oftast behöver oxideras i minst nio veckor. Detta begränsar användbarheten i infrastrukturprojekt, som inte utförs i ett forskningssyfte. Då sura sulfatjordar påträffas mer frekvent i Sverige, finns det ett behov av snabbare, men ändå tillförlitliga identifieringsmetoder. Detta för att säkerställa hållbar hantering av sura sulfatjordar utan negativ miljöpåverkan. Därför undersöks två alternativa identifieringsmetoder för sura sulfatjordar i detta projekt. Utöver identifiering, studeras också metallmobiliteten i sura sulfatjordar och hur metallösligheten påverkas av oxidationsprocessen. Detta är en viktig miljöaspekt för att kunna bedöma metalläckaget från dessa jordar och således bättre kunna förstå miljöbelastningen. Vidare kan modellering vara ett användbart verktyg för att simulera metallutlakning från sura sulfatjordar.

1.1 SYFTE OCH FRÅGESTÄLLNINGAR

Syftet med examensarbetet var att utvärdera och jämföra tre olika metoder för identifiering av sura sulfatjordar. Metoderna var inkubationsförsök, snabbtest och NAGpH-test. Detta för att utreda om SSJ kunde identifieras på ett tillförlitligt, träffsäkert och enkelt sätt som är praktiskt tillämpbart i olika projekt. Vidare undersöktes även mobiliseringen av metaller och metallösligheten i sura sulfatjordar. Syftet var att utöka förståelsen för hur utlakning av metaller påverkas vid oxidation av järnsulfider. Därför jämfördes metallösligheten i opåverkad (reducerad) och oxiderad sur sulfatjord. Slutligen undersöktes det också om metallösligheten kunde beskrivas med hjälp av geokemisk modellering, specifikt med Visual MINTEQ (Gustafsson 2022).

Frågeställningar som projektet ämnar besvara:

- 1. Hur tillförlitliga är de tre olika metoderna för identifiering av sura sulfatjordar?
- 2. Kan snabbtest användas som en tillräckligt tillförlitlig metod för att identifiera sura sulfatjordar?
- 3. Hur påverkas metallösligheten vid oxidation av sura sulfatjordar?
- 4. Är det möjligt att beskriva den pH-beroende lösligheten av kobolt och nickel i sura sulfatjordar med den geokemiska modellen Visual MINTEQ?

2 BAKGRUND

2.1 SURA SULFATJORDAR

2.1.1 Förekomst och bildning

I Sverige har sura sulfatjordar främst bildats från sulfidhaltiga sediment med mycket organiskt material som avsatts på Östersjöns botten och följaktligen sedan torrlagts med den isostatiska landhöjningen (Becher et al. 2019). Därför förekommer sur sulfatjord främst i områden som låg under Litorinahavets högsta kustlinje, som nåddes för cirka 8000 år sedan (figur 1). Sulfidmineral kan också bildas från sjösediment och bildningsprocessen är fortfarande pågående i grunda kustområden (Edén et al. 2023). Sur sulfatjord är främst kartlagd längs med norrlandskusten, men förekomsten är mer utbredd längs med hela Östersjökusten (SGU 2024), Mälardalen (Bayard & Moon 2014), Skåne (Åbjörnsson et al. 2018), västkusten (Bergström 2023 och i Västergötland (Nyman et al. 2023).



Figur 1. Karta för den marina gränsen i Sverige, vilket är områden där sura sulfatjordar har högst sannolikhet att påträffas.

Sedimenten består av järnsulfider i form av monosulfider (FeS) och/eller pyrit (FeS₂) (Becher et al. 2019). FeS är vanligast i norra Sverige och kännetecknas av svart färg, medan i Mälardalen och söderut utgörs sedimenten främst av pyrit som oftast är mer mörkgrå/grå till färgen. Bildningen av sulfidmaterial kräver vattenmättade, anaeroba och reducerande förhållanden. Processen kan sammanfattas som: sulfat (från havsvatten) + järn (från sötvatten eller bottensediment) + bakterier + energi (från organiskt material) bildar järnsulfider (Edén et al. 2023). Den fullständiga reaktionen för bildning av monosulfid visas i ekvation 1:

FeOOH + SO₄²⁻ +
$$\frac{9}{4}$$
CH₂O + 2H⁺ \rightarrow FeS + $\frac{9}{4}$ CO₂ + $\frac{15}{4}$ H₂ (1)

Pyrit har sedan bildats när monosulfider reagerar med svavel, se ekvation 2:

$$FeS + H_2S \rightarrow H_2 + FeS_2 \tag{2}$$

Under reducerande förhållanden (vattenmättade) är sulfider kemiskt stabila och utgör ingen miljörisk (Edén et al. 2023). När sulfider torrläggs och syresätts, oxiderar sulfider till sulfat och svavelsyra (H₂SO₄) produceras. Oxidationsprocessen är komplex med flera reaktionssteg bestående av både kemisk oxidation samt mikrobiell aktivitet. Oxidationen är beroende av både tillgång av syre samt vatten (Pousette 2010). Oxidationsreaktionen för pyrit är generellt långsammare än för monosulfider och den för pyrit förenklas i ekvation 3 (Edén et al. 2023):

$$4\text{FeS}_2 + 150_2 + 14\text{H}_2\text{O} \rightarrow 4\text{Fe}(\text{OH})_3 + 8\text{H}_2\text{SO}_4 \tag{3}$$

En typisk jordprofil för sur sulfatjord i Sverige och Finland har flera olika horisonter. Det översta lagret består av matjord och är cirka 30 cm djupt, och pH är relativt neutralt på grund av kalkning (Boman et al. 2023). Under detta lager följer en brunfärgad, gulfläckig horisont, där pH sjunker till cirka 4. Övergångszonen är gråaktig och pH ökar till följd av mer reducerade förhållanden. Slutligen finns en reducerad horisont som är mörkgrå/svart färgad och har högst pH. Detta kan förenklas till tre olika zoner: en oxiderad zon där förhållandena är omättade, en övergångszon där grundvattenytan varierar samt en reducerade zon som är vattenmättad (Pousette 2010), se figur 2.



Figur 2. Typisk jordprofil för SSJ med pH i fält samt de olika zonerna: oxiderad, övergång samt reducerad.

2.1.2 Mineralogi

En jord består av olika mineral, lerpartiklar samt organiskt material och den specifika sammansättningen beror på de geologiska förhållanden under vilka den har bildats (Larsson 2008). Bulkmineralogin i en jord påverkar dess egenskaper som textur, struktur, pH och

jonbyteskapacitet. Utöver sulfider består sura sulfatjordar av fler mineral, där illit är det vanligaste i Sverige. Andra förekommande mineraler är olika kiselföroreningar som kvarts, fältspat, glimmer, klorit, kaolinit, samt kalcit. Sura sulfatjordar som innehåller kalcit (CaCO₃), förbättrar jordens buffertförmåga genom att neutralisera försurningen och motverka pH-sänkningen i jorden (Trafikverket 2023).

2.1.3 Klassificering

Sura sulfatjordar är ett paraplybegrepp och innefattar många olika typer av jordar. Den traditionella indelningen av sur sulfatjord är: potentiellt sur sulfatjord samt aktiv (eller faktisk) sur sulfatjord (Boman et al. 2023). Detta särskiljer mellan reducerade och oxiderade förhållanden. Indelningen används dock inte i internationella klassificeringssystem eller i den svensk-finska systemet, i stället används hypersulfidmaterial (för reducerat) respektive sulfatmaterial (för oxiderat). Den svensk-finska klassificeringen är en anpassning av det förslagna systemet av the International Acid Sulfate Soils Working group (Sullvian et al. 2010). Det har utvecklats för att mer exakt kunna kategorisera de specifika sura sulfatjordar som förekommer i Sverige och Finland (Boman et al. 2023). Huvudindelningen är: ej SSJ, SSJ och para-SSJ. Det särskiljs också mellan minerogena jordarter (lera, silt och sand) samt organiska jordarter med > 20% organiskt material. I organiska jordarter förekommer mer organiska syror vilket också bidrar till pH-sänkning, därför används ett lägre gränsvärde pH < 3. Para-SSJ är en ny kategori som innefattar jordar som är gränsfall för att klassas som SSJ, men ändå kan vara måttligt försurande. SSJ och para-SSJ delas vidare in efter jordartstyp i kategorierna organisk, finkornig, grovkornig och osorterad, eftersom miljörisken kan variera mellan dem. Klassificeringen sammanfattas i tabell 1 nedan.

Material	Förklaring	Huvu	ıdklass	Jordtyp
Sulfid	\geq 0,01 % S i sulfidform			
Hyposulfid	Kan <u>inte</u> orsaka kraftig eller måttlig försurning vid oxidation av sulfider	Ej SSJ		
Hypersulfid	Kan orsaka <u>kraftig</u> försurning vid oxidation av sulfider			
Parahypersulfid	Kan orsaka <u>måttlig</u> försurning vid oxidation av sulfider	SSJ	Para-	Finkornig < 63 μ m Grovkornig ≥ 63 μ m
Parasulfat	pH i fält \leq 4–4,5 (3–3,5 organisk jord) till följd av oxidation av sulfider		221	Organisk (GF >20%)
Sulfatjord	pH i fält < 4 (< 3 organisk jord) till följd av oxidation av sulfider			

Tabell 1. Klassificering av sura sulfatjordar utifrån det senaste svensk-finska klassificeringssystemet (Boman et al. 2023).

2.2 ÖVERSIKT AV BEFINTLIGA KARAKTERISERINGSMETODER

2.2.1 Svavelhalt

Analys av svavelhalt kan indikera om jorden är sur sulfatjord. Den totala svavelhalten i ett reducerat jordprov korrelerar väl med sulfidhalten (Visuri et al. 2021). Begränsningar finns då svavel även kan finnas i organisk form, vilket inte ger samma försurning som sulfider. Detta avser lera, torv och grovkorniga jordar. Trafikverket (2023) delar in sur sulfatjord efter tre olika halter: < 0,1 % (försumbar försurningsrisk), 0,1–0,4 % (låg till hög försurningsrisk) och > 0,4 % (mycket hög försurningsrisk). Trafikverkets indelning utgår ifrån att hantera och schakta jordmassor.

2.2.2 Inkubationsförsök

I Sverige används pH-mätningar med inkubation av jordprover främst som metod för att identifiera och klassificera sura sulfatjordar. Inkubationsförsök är en etablerad metod som används internationellt och är den metod som det svensk-finska klassificeringssystemet baseras på (Boman et al. 2023). Inkubationsförsök simulerar den naturliga oxidationen av sulfider och syrabildning i jorden (Creeper et al. 2012). Den tar hänsyn till jordens naturliga buffertkapacitet med avseende på karbonater, organiskt material och lermineral. Vid inkubationsförsök mäts pH i fält och därefter får jordprover oxidera under kontrollerade förhållanden i laboratorium, med upprepade pH-mätningar under oxidationsprocessens gång. Den traditionella metoden tar 9–19 veckor.

2.2.3 Snabbtest

Snabbtest är ytterligare en metod som ursprungligen utvecklades i Australien (Sullivan et al. 2018a) för att identifiera sura sulfatjordar och har sedan vidareutvecklats i Finland (Miljöministeriet 2022). Snabbtest kan användas för att identifiera SSJ både i fält och laboratorium. Sulfiderna i jordproven utsätts för en katalyserad oxidation med 30-procentig väteperoxid (H_2O_2), varefter pH mäts.

2.2.4 NAGpH-test

En annan metod som används i Finland är NAGpH-test (Net Acid Generation pH). Metoden har traditionellt används för bedömning av syrapotenialen i sulfidberg och utförs av kommersiella laboratorier (Miljöministeriet 2022). I Finland används versionen "single addition", och jordproven oxideras med 15-procentig väteperoxid. Efter oxidationen mäts pH. Både NAGpH-test och snabbtest utförs med oxidationsmedlet väteperoxid, men metodiken och koncentrationen av väteperoxid skiljer sig åt.

2.2.5 Trafikverkets bedömning

Trafikverket (2023) har utvecklat en metod för att bedöma sura sulfatjordars potentiella försurningspotential utifrån syftet: hållbar hantering av förorenade jordmassor som behöver schaktas. Metodiken inkluderar analys av Fe, S, Ca, pH och jordart. En viktig bedömningsparameter är Fe/S-kvoten. Två pH-mätningar utförs; en direkt i fält eller på laboratorium (opåverkad jord) och en efter att provet har luftats samt torkat (24 h senare). För prover där försurningspotentialen är svårbedömd rekommenderas utökad analys med laktest enligt MRM-metoden. Då bedöms försurningspotentialen efter uppmätt pH efter att jorden lakats i 10 aeroba

steg. Hastigheten på pH-sänkningen samt lägsta pH kan vidare indikera försurningshastighet samt försurningsnivå. Utifrån detta klassas jorden efter den potentiella försurningsrisken i en av sju klasser.

2.3 MILJÖPROBLEM

Sura sulfatjordar blir ett miljöproblem när grundvattennivån sänks, vilket främst är en följd av förändrad markanvändning och mänsklig påverkan (Boman et al. 2023). Markavvattning för jord- och skogsbruk, muddring och urgrävning för infrastruktur har bidragit till att sur sulfatjord oxiderats. Försurningseffekten till följd av sur sulfatjord beror på mängd svavelsyra som produceras vid oxidation och jordens buffringskapacitet (Pousette 2010). Buffringskapaciteten påverkas av katjonbyteskapaciteten (CEC), organiskt material och förekomsten av karbonater (Boman et al. 2023).

Från sura sulfatjordar frigörs metaller och andra grundämnen som lakas ut i höga koncentrationer i avrinningsvattnet. Miljöfarliga ämnen som lakas ut är exempelvis Al, Cd, Co, Cu, Mn, Ni, Sr och Zn, vilket förorenar närliggande områden och negativt påverkar ekosystemen (Sohlenius & Öborn 2004; Fältmarsch et al. 2008; Åström et al. 2018; Mattbäck et al. 2022). Detta har lett till fiskdöd (Erixon 2009) och kan även påverka människors hälsa (Ljung et al. 2009). Utlakningen av Al, Cd, Co, Mn, Ni och Zn från sura sulfatjordar i Finland är större än utsläppen från all finsk industri (Sundström et al. 2002). Försurningen kan också leda till korrosion av olika konstruktionsmaterial som betong och stål (Pousette 2010). Ytterligare en miljörisk med sur sulfatjord är att det höga innehållet av organiskt material samt kväve under oxidationsprocessen kan bidra till växthusgasutsläpp av CO₂, N₂O och SO₂ (Westerberg et al. 2016) samt läckage av nitrat till grundvattnet (Yli-Halla et al. 2020). SSJ är också problematiskt ur ett geotekniskt perspektiv och således svårhanterade vid infrastrukturprojekt (Trafikverket 2023). Jordarna har oftast hög vattenhalt, vilket gör materialet instabilt med låg hållfasthet och ökad risk för sättningar (Pousette 2010).

2.4 METALLÖSLIGHET

2.4.1 Processer som påverkar metallöslighet

Metallösligheten styrs av markens geokemi. Metaller binds i marken till små suspenderade partiklar såsom organiskt material, (hydr)oxider och lermineral (Berggren Kleja et al. 2006). De kan också förekomma som utfällningar eller så finns jonerna i löst form. Fördelningen av de olika kemiska formerna som metallerna finns i mark och grundvatten behövs för riskbedömning. Den fria metalljonen är generellt den mest biotillgängliga och toxiska formen. I löst form förekommer metaller antingen som fria joner eller i lösta komplex. De lösta komplexen bildas mellan metaller och olika anjoner i vattnet. Den viktigaste typen bildas med humusämnen som är högmolekylära organiska syror och detta bidrar till transporten av metaller. Utfällningar bildas när metalljoner förekommer i högre koncentration än vad markvattnet kan hålla löst. Utfällningar är av särskild betydelse vid reducerande förhållanden då metaller bildar sulfider. Vid högt pH kan utfällningar även bildas med (hydr)oxider och karbonater.

Adsorption är en process när metalljoner binder till en fast yta i marken (Berggren Kleja et al. 2006). Lösta metalljoner är i jämvikt med den adsorberade mängden. Adsorptionen påverkas främst av ytkomplexbildning men även av jonbyte. Ytkomplexbildning avser metaller som binder starkt till ytan av (hydr)oxider (järn, aluminium eller mangan) och humusämnen. Denna process är starkt pH-beroende, då jonernas och ytornas laddning påverkas av pH vilket styr bildningen av ytkomplex. Anjoner adsorberas starkare vid lågt pH och katjoner vid högt pH. Metallkatjoner binds till humusämnen vid lägre pH än oxider och kan därför vara en styrande process. Dessa komplex löses upp vid högt pH, vilket kan bidra till en ökad metallöslighet. Adsorptionen påverkas av konkurrerande joner som Al och Ca vilket kan påverka i vilken utsträckning en metall adsorberas. Vid jonbyte sker ett jonbyte mellan katjon i lösning och en katjon bunden till ytan av lermineral och humusämnen som är negativt laddade. Bindningen mellan katjoner och ytan är elektrostatisk. Katjonbyteskapacitet (CEC) är ett mått för hur mycket katjoner marken kan binda (Stendahl 2024). De utbytbara katjonerna är främst Ca^{2+,} Mg²⁺, K⁺ Na⁺, H⁺ och Al⁺.

2.4.1 Kadmium (Cd), Kobolt (Co), Nickel (Ni) och Zink (Zn)

I sura sulfatjordar är totalhalten av Cd, Co, Ni och Zn oftast inte högre än i andra lerjordar (Sohlenius & Öborn 2004). Dessa metaller förekommer i viss utsträckning bundet till sulfider och vid oxidation frigörs dessa vilket ökar metallösligheten. De kemiska beteenden för Cd, Co, Ni och Zn är lika varandra och domineras av den katjoniska formen, men de förekommer även i komplex med karbonater och humusämnen (Berggren Kleja et al. 2006). Komplexbildning till organiskt material samt järn- aluminium- och manganoxider förekommer också vid höga pH. Sammanfattningsvis så är metallerna relativt lättlösliga vid lågt pH och mindre lösliga vid högt pH.

2.4.2 Arsenik (As) och Krom (Cr)

Cr och As är mindre metallösliga i sur sulfatjord än Cd, Co, Ni och Zn och förekommer främst i anjonisk form (Sohlenius & Öborn 2004). Vid pH 4,5–6,2 förekommer As som As(V), men också som As(III) vid låga pH. As(V) adsorberas starkt till järn- och aluminiumoxider vid pH < 8 och As(III) vid pH > 7 (Berggren Kleja et al. 2006). Cr kan båda vara löst som Cr(III) (vid lågt pH) och Cr(VI) (vid högt pH). Cr(VI) adsorberas till järn- och aluminiumoxider (pH < 6). Cr(III) bildar också komplex med organiskt material och är i formen Cr(III) mindre lösligt medan Cr(VI) har högre metallöslighet (Berggren Kleja et al. 2006). Metallösligheten för As och Cr är mer komplex jämfört med den för Cd, Co, Ni och Zn (Sohlenius & Öborn 2004).

3 METODER OCH MATERIAL

3.1 PROVTAGNING I FÄLT

Fältarbetet utfördes den 2 och 3 april 2024. Jordprover togs från tre olika områden nära Uppsala. I två av områdena förekom det sura sulfatjordar och dessa benämns som SSJ01 och SSJ03. Det tredje området, REF01, var en referensjord som inte skulle innehålla sulfider. Provplatserna valdes ut baserat på tidigare kartläggning av sura sulfatjordar (Nyman et al. 2023; Bayard & Moon 2014). För samtliga provtagningsplatser undersöktes två jordprofiler för varje plats, sammanlagt sex jordprofiler. Avstånden mellan provpunkterna A och B var 26 m, 25 m respektive 22 m för SSJ01, SSJ03 och REF01. I figur 3 redovisas provtagningsplatser och provpunkterna. Vädret vid provtagningen var båda dagarna cirka 0°C med frisk till hård vind. Den 2 april då proverna SSJ01 och REF01 togs, var det molnigt med kortvarigt snöfall. Den 3 april när SSJ03 provtogs, var det halvklart.



Figur 3. Översiktskarta för området och utmärkta provtagningsplatser samt placering av provpunkter

Provtagningen utfördes med en handhållen auger som var 1 m lång och kunde förlängas till 2,5 m. Augerns innerdiameter var endast 2 cm och därför borrades det fyra hål intill varandra för varje profil. Provmängden från de fyra borrhålen lades ihop till en enda jordprofil. Det totala djupet för varje jordprofil blev 2,0–2,4 m, vilket var cirka 1 m under den uppskattade grundvattenytan. Uttag av jordprover togs med ett intervall på 20 cm. Sammanlagt togs 64 jordprover och provmängden var ca 200 g per prov. Dessa förvarades i plastpåsar och homogeniserades. I fält mättes pH för varje jordprov med en WTW pH 3110 och uttag gjordes för inkubationsförsök och snabbtest. Resterande delmängdjord förvarades i plastpåsar för senare analyser. I fält observerades jordtyp, färg, struktur, lukt, grundvattennivå och nivå för

reducerad zon genom okulär bedömning. Jordprofilerna och omgivningen fotograferades. I tabell 2 sammanfattas information för provtagningsplatserna

Provtagningsplats	Jordtyp	Provtagningsdatum	Totalt provdjup (m)	M ö.h.
SSJ01A	Gyttjelera	2 april 2024	$0,\!0-2,\!4$	8,0
SSJ01B	Gyttjelera	2 april 2024	$0,\!0-2,\!4$	8,0
SSJ03A	Gyttjelera	3 april 2024	$0,\!0-2,\!0$	0,4
SSJ03B	Gyttjelera	3 april 2024	$0,\!0-2,\!0$	0,0
REF01A	Postglacial lera	2 april 2024	$0,\!0-2,\!0$	10
REF01B	Postglacial lera	2 april 2024	$0,\!0-2,\!0$	10

Tabell 2. Provtagningsinformation för provtagningsplatserna.

3.2 ANALYSER

I detta avsnitt redovisas de analyser som genomförts på jordproverna samt urval av så kallade specialprover.

3.2.1 Kemiska analyser

En delmängd av alla 64 jordprover analyserades initialt vid det ackrediterade laboratoriet ALS Scandinavia. Proverna torkades vid 50°C och proverna siktades till < 2 mm enligt ISO 11464:2006 och homogeniserades genom mortling. Sedan lakas de i 7M HNO₃ och halterna korrigerades till TS 105 °C. Metallanalysen utfördes med ICP-SFMS och proverna analyserades för 11 metaller: As, Ba, Cd, Co, Cr, Cu, Hg, Ni, Pb, V och Zn. Ämnena Fe och S, samt torrsubstans (TS), glödförlust (GF) och glödrest (GR) vid 550°C analyserades också. Totalt organiskt kol (TOC) beräknades för proverna utifrån glödgningsförlust enligt SS-EN15935:2021 utg2, vilket inte är ett ackrediterat test. Van Bemmelen-faktorn användes för att omvandla GF till TOC, och då antas organiskt material innehålla 58 % kol. Därför bestämdes TOC också enligt direkt metod; CSN ISO 10694 för specialproverna.

3.2.2 Specialprover

Av de 64 proverna valdes fyra prover ut för vidare analyser med avseende på metallmobilitet. Dessa benämns som specialprover. Urvalet syftade att representera en variation av sura sulfatjordar. Proverna valdes ut baserat på följande kriterier:

- Tre sura sulfatjordsprover och ett referensprov
- Minst ett prov från varje provtagningsområde
- Prov från de tre nedersta (reducerade) skikten
- Varierande svavelhalt för sura sulfatjordsprover
- Varierande halt TOC

3.2.3 XRPD-analys

Jordarnas bulkmineralogi analyserades med X-ray Powder Diffraction (XRPD) vid The James Hutton Institute. Ett prov från SSJ01, SSJ03 och REF01 analyserades. De olika faserna i det polykristallina materialet kvantifierades och resultaten är ackrediterade enligt GM003 och GM004.

3.2.4 Kornstorleksfördelning

Ett prov från varje profil (samma som för specialproverna), analyserades för kornfördelning i 7 mätpunkter för 0,002–0,063 mm. Analysen utfördes av ALS Scandinavia enligt F.d. SS027123 mod. och F.d. SS027124 mod. Utifrån resultatet beräknades lerhalten (%) i proverna som viktprocenten < 0,002 mm.

3.3 IDENTIFIERINGSMETODER

De tre identifieringsmetoderna som utfördes var inkubationsförsök, snabbtest och NAGpH-test. För samtliga pH-mätningar i fält och i laboratorium på SLU, användes en WTW pH-meter 3310 med en Hamilton flatelektrod. Innan varje mättillfälle kalibrerades pH-mätaren i två steg med buffertlösningar för pH 7 och 4.

3.3.1 Inkubationsförsök

Metodiken för inkubationsförsök i detta projekt utgick ifrån Creeper et al. (2012). En delmängd av de 64 homogeniserade proverna, överfördes till inkubationslådor (chip trays) och duplikat togs för varje enskilt prov. Dessa fylldes i 5–10 mm tjocka lager för varje prov och inkuberades vid SLU, se figur 4. Proverna fick oxidera i rumstemperatur under fuktiga förhållanden (nära fältkapacitet) genom regelbunden tillsatts av avjoniserat vatten. Proverna fick sedan genomgå naturlig aerobisk oxidation under 9 veckor. pH-mätningar utfördes veckovis direkt i inkubationslådorna, genom att jordproverna först fuktades med avjoniserat vatten. Efter 9 veckor fortsatte inkubationen, då flera prover inte uppfyllde kriterierna för att klassificeras som SSJ (pH mellan 4,0 och 6,5). Nya mätningar gjordes efter 10, 11 och 13 veckor. Proverna klassificerades sedan enligt det svensk-finska systemet vilket sammanfattas i avsnitt 3.4. Provernas pH uppmätt i fält vid provtagning av jordprofilerna benämns som pH_{FÄLT}. Uppmätt pH vid avslutat inkubationsförsök (efter 13 veckor) benämns som pH_{INK}.



Figur 4. De 128 proverna i inkubationslådor.

3.3.2 Snabbtest

Metodiken för snabbtest i detta projekt, baserades på det finska miljöministeriets vägledning avseende identifiering av sura sulfatjordar (Miljöministeriet 2022). Snabbtest är inte en lämplig metod för jord som innehåller mycket organiskt material (GF > 20 %). Snabbtestet utfördes på tre jordprover för alla sex jordprofiler och i duplikat. De tre jordproverna för varje profil, utgjordes av de tre nedersta skikten som bedömdes vara i den reducerade zonen. Snabbtestet utfördes först i fält och sedan i laboratorium. De uppmätta pH-värdena efter utfört snabbtest, betecknas som pH_{FOX1} och pH_{FOX2} för fält respektive laboratorium (från eng. "field oxidised").

2 ml av varje jordprov användes för experimentet och mättes upp med en avkapad spruta och tillsattes i 50 ml provrör. 2 ml motsvarar cirka 1 g torrsubstans. 30 % H₂O₂ med pH justerat till 4,9–5,0 med 0,1M NaOH, tillsattes i omgångar om 1 ml till provet med 10 minuters mellanrum, för att reaktionen skall jämnas ut innan nästa tillsats. Vid kraftig reaktion och om materialet började koka våldsamt, tillsattes några ml avjoniserat vatten. Totalt tillsattes 5 ml H₂O₂. Efter att reaktionen pågått i 1h (±5 min), mättes pH i provet. Skillnad i pH uppmätt i fält samt efter snabbtest (Δ pH) och intensiteten på reaktionen, kan indikera om prover är SSJ. Om provet är SSJ börjar det vanligtvis koka, bubbla och ryka, se figur 5 för uppställning.



Figur 5. Snabbtest utfört i fält (vänster) och i laboratorium (höger).

3.3.3 NAGpH-test

I detta arbete skickades sex jordprover, ett prov från varje jordprofil till det ackrediterade laboratoriet ALS Scandinavia. Proverna som skickades var specialproverna samt ett prov vardera från profilerna SSJ01A och REF01A. Proverna torkades innan de krossades till < 2 mm, och sedan maldes till 85 % $< 75 \mu$ m. NAGpH-testen (single addition) utfördes genom att 250 ml 15 % väteperoxid tillsätts till 2,5 g provmaterial. Detta fick reagera över natten, och sedan kokades provet och efter det svalnat mättes pH, vilket betecknas som NAGpH.

3.3.4 Korrelationsanalys av identifieringsmetoderna

Sambandet mellan totalhalt svavel och det lägsta pH-värdet för de reducerade skikten undersöktes med en korrelationsanalys. Analysen utfördes för inkubationsförsök, snabbtest (fält och laboratorium) samt NAGpH-test med Spearmans rangkorrelation. Spearmans valdes då den kan hantera icke normalfördelade data och icke-linjära samband (Yadolah 2010). Metoden

kvantifierar styrkan och riktningen i ett monotoniskt samband, vilket i detta fall var för variablerna svavel och pH. Korrelationskoefficienten varierar mellan -1 (perfekt negativt samband) och 1 (perfekt positivt samband) och 0 indikerar ingen korrelation. P-värdet beräknades tillsammans med korrelationskoefficienten och anger signifikansen i sambandet (att det inte beror på slumpen). För värden under 0,05 indikeras en statistisk signifikans. Samtliga beräkningar utfördes i MATLAB.

3.4 KLASSIFICERING AV SUR SULFATJORD

Utifrån de olika identifieringsmetoderna, klassades jordarna som SSJ om följande pH understegs: för snabbtest och NAGpH-test om pH understeg 3 respektive 4,5 (Miljöministeriet 2022) och under 4 efter inkubation (Boman et al. 2023). Denna klassificering utfördes endast för de reducerade skikten. Gränsen är lägre för snabbtest än vid inkubationsförsök, då tillsatsen av väteperoxid orsakar en snabbare samt kraftigare pH-sänkning är den som förekommer vid naturlig oxidation. En profil klassades som SSJ om minst ett jordprov understeg gränsvärdet. Detta sammanställs nedan i tabell 3.

Tabell 3. Gränsvärden för klassificering av SSJ utifrån inkubationsförsök, snabbtest samt NAGpH-test.

Klassificering	рН _{імк}	рН _{гох}	NAGpH
SSJ	< 4	< 3	< 4,5

Från inkubationsförsöket klassades jordarna även utifrån det senaste svensk-finska systemet av Boman et al. 2023. Först klassades jordprofilerna för varje 20 cm skikt efter typ av material baserat på pH och svavelhalt, vilket sammanfattas i tabell 4.

Tabell 4. Klassificering av material utifrån det senaste klassificeringssystemet i Sverige och Finland för minerogena jordarter (Boman et al. 2023). pH_{FÄLT} är uppmätt pH i fält och pH_{INK} är pH från avslutat inkubationsförsök. ΔpH är skillnaden mellan pH_{FÄLT} och pH_{INK} som måste uppnås.

Material	pH _{FÄLT}	рН _{INK}	ΔрН	S (%)
Ej sulfid	-	-	-	<0,01
Sulfid	-	-	-	≥0,01
Hyposulfid	≥4,0	≥4,6	-	≥0,01
Hypersulfid	≥4,0	<4,0	≥0,5	≥0,01
Parahypersulfid	>4,5	4,0-4,5	≥0,5	≥0,01
Parasulfat	4,0–4,5	4,0-4,5	<0,5	-
Sulfat	<4,0	-	-	-

När alla skikten i jordprofilen hade klassats efter material, kunde de sedan klassas efter huvudklassen. Sammanfattningsvis klassas jorden som *Ej SSJ* om profilen endast består av ej sulfidmaterial, sulfidmaterial eller hyposulfidmaterial. *Para-SSJ* om jorden består av minst ett skikt (≥ 15 cm) parasulfatmaterial och/eller parahypersulfidmaterial (men inga lager av sulfatmaterial eller hypersulfidmaterial). Vidare klassas det som *SSJ* om jorden består av minst ett skikt sulfatmaterial och/eller parasulfatmaterial tillsammans med hypersulfidmaterial och/eller endast hypersulfidmaterial. *Para-SSJ* och *SSJ* kan därefter delas därefter in om de är aktiva och syraproducerande som *parasulfatjordar* respektive *sulfatjordar* eller om de potentiellt kan bli syraproducerande som *hypersulfidjordar* respektive *parahypersulfidjordar*.

Slutligen delas de in utefter jordtyp: finkornig, grovkornig, osorterad och organisk. Detta sammanfattas i tabell 5 nedan.

Material	Huvud	Huvudklass Underklass		ISS	Jordtyp
Ej sulfid					
Sulfid	Ej SSJ				
Hyposulfid					
Hypersulfid			Hypersulfidjord	Potentiell sur	Finkornig < 63 µm
Parahypersulfid	SSJ	Para-	Parahypersulfidjord	sulfatjord	Grovkornig $\geq 63 \ \mu m$
Parasulfat		SSJ	Parasulfatjord	Aktiv sur	Osorterad (morän)
Sulfat			Sulfatjord	sulfatjord	Organisk (GF >20%)

Tabell 5. Klassificering av SSJ efter huvudklass, underklass och jordtyp (Boman et al. 2023).

3.5 LAKTESTER OCH METALLMOBILITET

Metallmobiliteten i jordarna undersöktes genom att olika laktester utfördes. Specialproven användes för försöken som utgjordes av tre SSJ-prover och ett referensjordsprov. I samtliga fall så utfördes experimenten i duplikat, dvs två upprepningar per prov. Resultaten för duplikaten analyserades och ett medelvärde beräknades. Prov från alla laktester analyserades på ALS med analyspaket V-2 metaller (22) exklusive Hg för ämnena: Al, As, Ba, Ca, Cd, Co, Cr, Cu, Fe, K, Mg, Mn, Mo, Na, Ni, P, Pb, Si, Sr, V, och Zn. Metoderna för analysen var W-AES-1A för Ca, Fe, K, Mg, Na och Si och W-SFMS-5A för övriga metaller.

3.5.1 Extraktion med 0,43 M HNO₃

En extraktion med 0,43 M HNO₃ utfördes på specialproverna, för att kvantifiera mängden metall som är ytligt bundet till jorden och därför potentiellt kan frigöras. Metoden ger den geokemiskt aktiva fraktionen av metallen, vilket behövdes för att undersöka metallernas löslighet. Extraktionsmetoden som följdes var enligt ISO 17586:2016. Delmängder av specialproverna användes som var opåverkade av oxidation (reducerade).

3,00 g fuktig jord vägdes upp för varje specialprov och i duplikat i 50 ml centrifugrör med lock. Sedan tillsattes 30,0 ml 0,43 M HNO₃ och rören skakades i skakapparat i två timmar. Proven centrifugerades vid 3000 rpm i 20 min. Proven filtrerades med ett 0,2 µm Acrodisc PF filter ner i 20 ml scintillationsburkar. Proverna skickades sedan på analys.

3.5.2 pH-beroende lakbarhet

pH-beroende laktest utfördes för att undersöka hur lösligheten av As, Cd, Co, Cr, Ni och Zn beror på pH i jordproverna. Fyra olika pH-miljöer skapades med hjälp av salpetersyra (HNO₃), natriumhydroxid (NaOH), kalciumklorid (CaCl₂) och avjoniserat vatten. Detta utfördes på de fyra specialproverna i duplikat, sammantaget 32 prover för fyra steg på pH-skalan. Delmängder av specialproverna användes som var opåverkade av oxidation (reducerade). Resultatet från detta försök användes för att analysera hur metallösligheten beror på pH.

Lösningar av 0,002 M CaCl₂,0,03 M HNO₃ och 0,03 M NaOH blandades. För varje specialprov vägdes 2,00 g fuktig jord upp i åtta 50 ml centrifugrör med lock. Lösningarna tillsattes enligt

tabell 6 nedan för varje jordprov. Rören skakades i en skakapparat i fem dygn och centrifugerades vid 3000 rpm i 20 min. pH-metern kalibrerades och pH mättes i lakvattnet för varje prov. Lakvattnet filtrerades med ett 0,2 μ m Acrodisc PF filter ned i en 20 ml scintillationsburk. Proven konserverades slutligen genom att 30 % HNO₃ tillsattes till slutkoncentrationen 1%, sedan analyserades proverna.

Lösning	0,002 M CaCl ₂	0,03 M HNO ₃	0,03 M NaOH	Avjoniserat vatten
Volym	ml	ml	ml	ml
pH-steg 1	20	10	0	10
pH-steg 2	20	4	0	16
pH-steg 3	20	0	0	20
pH-steg 4	20	0	5	15

Tabell 6. Volym lösning som tillsattes till varje provrör för de fyra specialproverna samt vilket pH-steg det motsvarar.

3.5.3 Extraktion med 0,001 M CaCl₂ av oxiderade prover

För specialproverna i duplikat som oxiderat i inkubationsförsöket i nio veckor, utfördes extraktion med 0,001 M CaCl₂. Detta var samma neutrala lösning som tillsattes för pH-steg 3 i försöket med pH-beroende lakbarhet se avsnitt 3.5.2, tabell 6. Detta utfördes för att kunna jämföra metallösligheten mellan det opåverkade (reducerade) och det oxiderade provet. Försöket utfördes som beskrivet i avsnitt 3.5.2 men endast för pH-steg 3.

3.6 MODELLERING I VISUAL MINTEQ

Geokemisk modellering utfördes med Visual MINTEQ för att utvärdera metallösligheten. Visual MINTEQ ver. 4.0 (4.05) användes som är en specieringsmodell och kvantifierar metallers olika kemiska former i vatten samt utfällningsreaktioner (Berggren Kleja et. al 2006). Modellen baseras på kemisk jämvikt med undermodeller för hur metaller binder till ytor för ytkomplexbildning, komplexbildning till organiskt material samt lermineral (Gustafsson et al. 2007). Modelleringen begränsades till Co och Ni och användes för att simulera metallösligheten under olika förhållanden. De fyra specialproven modellerades för de fyra pH-stegen från det pH-beroende laktestet och modellresultaten jämfördes med dessa analysresultat.

3.6.1 Modellparametrar

För organisk komplexbildning användes modellen SHM (Stockholm Humic Model). Modellen innefattar fast organiskt kol och löst organiskt kol samt att de består av humusämnena fulvosyra och humussyra (Gustafsson & Antelo 2022). SHM antar sedan att endast fulvosyra löses upp. Adsorptionen modellerades med två ytor Fh-FCD för ferrihydrit, som är en Fe-(hydr)oxid, respektive Fixed-charge site för lermineral. Kemisk jämvikt antogs för ferrihydrit och Al-(hydr)oxid.

Det fanns inte tillräckligt med provmaterial för att bestämma katjonbyteskapaciteten (CEC) med en separat extraktion (exempelvis med 0,1M BaCl₂). Därför uppskattades CEC från extraktion med 0,43M HNO₃ (avsnitt 3.5.1) som summan av Ca²⁺, Mg²⁺, K⁺ och Na⁺. CEC [cmol_c/kg TS] beräknades enligt ekvation 4,

$$CEC = \sum_{i}^{n} \frac{C_i \times V \times z_i}{m_i}$$
(4)

där C_i är koncentration katjon [cmol/l], V volym lakvätska [l], z laddning på katjonen och m_i är jordmassan [kg TS]. CEC uppskattades också utifrån bulkmineralogin erhållen med XRPDanalysen (avsnitt 3.2.3) med CEC för de olika markkomponenterna. Medianvärden användes för CEC angivna i ett intervall (tabell 7). CEC [cmol_c/kg] beräknades enligt ekvation 5,

$$CEC = \sum_{i}^{n} \frac{M_{CEC} \times F}{100}$$
(5)

där M_{CEC} är medianvärdet för markkomponentens CEC och F är vikt-% av markkomponenten i jordarna.

Mineral	CEC [cmol./kg]
Kvarts	0_2 8
Nyai ts Dlagiolzlas	0.0
I lagiokias	0,9
IIIIt	9–30
Kalifältspat	3,7
Smektit	40–150
Muskovit	52
Klorit	1–50
Hydrobiotit	17
Illit/Smektit –	15–90
Mixed Layered	
Glimmer	17
Kaolinit	0,9–40
Kalcit	0,2–1,3
Pyrit	1,5
ТОС	150-400

Tabell 7. CEC [cmol/kg] för olika mineral och organiskt material (TOC) (Rennert et al. 2020; Appelo & Postma 2004).

Vid modelleringen i Visual MINTEQ användes CEC beräknad enligt ekvation 4 ovan. I tabell 8 nedan presenteras antaganden som gjordes och sammanfattning av parametrar som användes som indata i modelleringen.

Tabell 8. Parametrar och antaganden för simulerade specialprover i Visual MINTEQ.

Parameter	Referens				
рН	Uppmätt pH (avsnitt 3.5.2)				
Komplexbildning med organiskt ma	Komplexbildning med organiskt material (SHM)				
Organiskt kol (SOC) Löst organiskt kol (DOC) FA (fulvosyra) HA (humussyra) Aktiv DOM (löst organisk substans) som är FA	TOC analyserad (avsnitt 3.2.1) Antagande: 5 mg/l Antagande: 50 % (Tiberg et al. 2016) Antagande: 50 % (Tiberg et al. 2016) Antagande: 50 %				
Adsorption (Ytkomplexbildning)					
Fe i ferrihydrit	 Adsorptionsmodell: Fh-FCD (Gustafsson & Antelo 2022) [Fe] från extraktion med 0,43M HNO₃ (avsnitt 3.5.1) 				
Jonbytesgrupper lermineral	 Adsorptionsmodell: Fixed-charge site Antagande: CEC (permanent) lermineral 0,1 mol/kg ler (Eriksson et al. 2011) Lerhalt från kornstorleksfördelning (avsnitt 3.2.4) 				
Kemisk jämvikt med (hydr)oxider					
$Al^{3+} Fe^{3+}$	Jämvikt med Al(OH ₎₃ (soil) Jämvikt med ferrihydrit (aged)				
Katjonbyteskapacitet (CEC)					
Ca^{2+} Mg^{2+} K^+ Na^+	Från extraktion med 0,43M HNO ₃ (avsnitt 3.5.1), korrigerad för tillsatt 0,002M CaCl ₂ (avsnitt 3.5.2) Från extraktion med 0,43M HNO ₃ (avsnitt 3.5.1) Från extraktion med 0,43M HNO ₃ (avsnitt 3.5.1) Från extraktion med 0,43M HNO ₃ (avsnitt 3.5.1), korrigerad för tillsatt 0,03M NaOH (avsnitt 3.5.2)				
Korrigerade koncentrationer					
NO ₃ ⁻ Cl ⁻	Från tillsatt 0,03 M HNO3 (avsnitt 3.5.2) Från tillsatt 0,002M CaCl2 (avsnitt 3.5.2)				
Geokemiskt aktiv fraktion					
Co ²⁺ Ni ²⁺	Från extraktion med 0,43M HNO ₃ (avsnitt 3.5.1) Från extraktion med 0,43M HNO ₃ (avsnitt 3.5.1)				

3.6.2 Modellvalidering

RMSE (Root Mean Square Error) beräknades för att kvantifiera skillnaden mellan uppmätt data (laktest) och predikterade data (modell). Lägre RMSE indikerar en bättre modellanpassning och ger ett kvantitativt mått på modellens noggrannhet. RMSE för modellen beräknades enligt ekvation 6,

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_{Ui} - y_{Pi})^2}$$
(6)

där *n* är antal datapunkter, y_{Ui} och y_{Pi} är uppmätt respektive predikterade data för den i:te datapunkten (Hodson 2022).

4 RESULTAT

4.1 PROVTAGNING I FÄLT

Från den okulära bedömningen som utfördes i fält, bedömdes båda profilerna för SSJ01 och SSJ03 bestå av sulfidhaltig siltig lera, (su)siLe. Det fanns ingen märkbar skillnad mellan profilerna för SSJ01 och vid 1,4 m djup övergick färgen till mörkgrå. För SSJ01 var A betydligt mörkare grå/svart från 1,4 m djup, jämfört med B. Då vädret var kallt och blåsigt, kunde ingen lukt uppfattas från jorden. Samtliga SSJ-profiler följde typiska pH för sura sulfatjordar med pH mellan 4,5–5,5 för att sedan öka med djupet vid den uppskattade grundvattenytan till pH 8 (se figur 8 för pH-variation genom hela jordprofilen). För REF01 bedömdes profilerna inte innehålla sulfidhaltig lera, utan vara siltig lera, siLe. Lägsta pH för profil REF01A och B uppmättes i det översta skiktet och pH sjönk sedan genom hela profilen med djupet. I tabell 9 nedan sammanställs resultat från provtagningen samt jordartsklassificering och lerhalt från kornfördelningsanalysen.

Provpunkt	Lägsta pH _{FÄLT}	Djup vid lägsta pH _{FÄLT (} m)	Djup till GVY (m)	Jordarts- klassificering (okulär)	Jordarts- klassificering (analyserad)	Lerhalt (%)
SSJ01A	4,6	0,8-1,0	1,0-1,3	(su)siLe	-	-
SSJ01B	4,3	0,8-1,0	1,0-1,3	(su)siLe	siLe	37
SSJ03A	4,4	0,8-1,0	0,7-0,8	(su)siLe	Le	40
SSJ03B	4,4	0,8-1,0	0,7-0,8	(su)siLe	siLe	37
REF01A	5,5	0,0-0,2	1,0-1,3	siLe	-	-
REF01B	6,2	0,0-0,2	1,0-1,3	siLe	siLe	27

Tabell 9. Sammanställning av lägsta uppmätta pH i fält, motsvarande djup, uppskattad grundvattenyta (GVY), jordartsklassificering samt lerhalt. Sulfidhaltig siltig lera förkortas (su)siLe, siltig lera som siLe och lera som Le.

4.2 KEMISK KARAKTÄRISERING AV SSJ01, SSJ03 OCH REF01

I detta avsnitt presenteras resultat från de kemiska analyserna för grundämneskoncentrationer, specialprover och från den mineralogiska karaktäriseringen med XRPD-analys.

4.2.1 Kemiska analyser

I figur 6 nedan presenteras variationerna av As, Co, Cr, Ni och Zn med djupet för varje provpunkt för samtliga jordprofiler. Alla sex profiler har liknande totalhalter för de fem metallerna. Halterna är genom profilen relativt konstanta, men lägre vid den uppskattade grundvattenytan. Betydligt högre halter noteras för Ni och Zn, främst i SSJ03A och B strax under den uppskattade grundvattenytan (GVY-yta).



Figur 6. Totalhalt [mg/kg TS] As, Co, Cr, Ni och Zn i jordprofilerna SSJ01A, SSJ01B, SSJ03A, SSJ03B, REF01A och REF01B. Uppskattade GVY-ytan visas också.

I figur 7 presenteras halterna för Fe och S. Järnhalterna ligger runt 4 % för samtliga jordar med högst halt Fe för SSJ01 vid 0,5 m djup. Svavelhalten är låg ner till grundvattenytan för SSJ01 och SSJ03, men ökar sedan kraftigt vilket indikerar övergångszon följt av reducerad zon. För REF01 är koncentrationen S låg genom hela profilen.



Figur 7. Totalhalt [% TS] Fe och S i jordprofilerna SSJ01A, SSJ01B, SSJ03A, SSJ03B, REF01A och REF01B. Uppskattade GVY-ytan visas också.

4.2.2 Specialprover

De fyra specialproven som valdes ut presenteras i tabell 10 nedan, med totalhalter av S, Fe samt pH uppmätt i fält (pH_{FÄLT}). Resultat för TOC analyserad (TOC_A), TOC beräknad (TOC_B), Δ TOC presenteras också. Totalhalten svavel för SSJ-proven varierar mellan 12400 och 19500 mg/kg TS och är låg för referensjorden. En stor skillnad påvisas mellan TOC_A och TOC_B, där TOC_B är betydligt högre för samtliga prover.

Provnamn	рН _{FÄLT}	S	Fe	TOCA	TOC _B	ΔΤΟϹ
		[mg/kg TS]	[mg/kg TS]	[% TS]	[% TS]	
SSJ01B 2,0–2,2 m	7,5	14600	42900	3,11	4,34	1,23
SSJ03A 1,6–1,8 m	7,9	19500	48000	2,65	4,04	1,39
SSJ03B 1,8–2,0 m	7,8	12400	40100	3,23	5,57	2,34
REF01B 1,6–1,8 m	7,8	92,2	37000	0,92	2,05	1,13

Tabell 10. Totalhalt S, Fe, samt pH_{FÄLT, TOCA, TOCB och Δ TOC för specialproverna.

4.2.3 XRPD-analys

Nedan i tabell 11, presenteras bulkmineralogin för det prov för varje profil som analyserades. Tri står för trioktaedrisk, di för dioktaedrisk, I/S-ML för (Illit/Smektit – Mixed Layered) och Amorf-O för amorf-organisk. De tre jordproverna har en liknande mineralogisk sammansättning men det finns skillnader mellan dem. Kvarts var den mest förekommande mineralen för samtliga prover, följt av plagioklas, illit och kalifältspat. Smektit(Di) och Smektit(Tri) varierar mellan proverna och är högst i referensprovet. Pyrit och Aragonit detekterades endast i SSJ-proven, och ingen kalcit fanns i SSJ03B. Muskovit, klorit(tri) och hydrobiotit fanns i alla prover med mindre variation mellan proverna. Amorfo-O detekterades inte i referensprovet.

Mineral	SSJ01B 2,2–2,4 m	SSJ03B 1,6–1,8 m	REF01B 1,4–1,6 m
Kvarts	19,1	20,1	25,9
Plagioklas	14,6	16,2	17,7
Illit	18,3	17,2	15,2
Kalifältspat	10,7	12,0	12,7
Smektit(Di)	2,1	1,7	6,4
Muskovit	3,2	4,0	4,4
Klorit(Tri)	4,1	4,6	3,8
Hydrobiotit	2,7	3,3	3,1
Smektit(Tri)	0,3	0,4	2,6
I/S-ML	NaN	3,0	2,4
Glimmer(Tri)	4,1	4,5	2,2
Amfibol	2,0	2,2	2,1
Kaolinit	1,4	1,5	1,0
Kalcit	0,1	NaN	0,4
Anatas	0,2	0,2	0,1
Pyrit	1,6	2,3	NaN
Aragonit	5,9	NaN	NaN
Vermikulit	NaN	NaN	NaN
Amorfo-O	9,6	6,8	NaN
Di(sum)	23,6	25,9	28,4
Tri(sum)	11,2	12,8	11,7
Total	100	100	100

Tabell 11. Mineralkompositionen i vikt-% för varje prov. Icke-lermineral är markerade i kursiv och NaN indikerar att mineralet inte detekterades.

4.3 IDENTIFIERINGSMETODER

4.3.1 Inkubationsförsök

Resultaten för inkubationsförsöket för varje jordprofil presenteras nedan. Ett medelvärde beräknades för duplikaten och i figur 8 redovisas S (%), pH_{FÅLT} och pH_{INK} efter 13 veckors inkubation mot djupet. I graferna syns en tydlig skillnad mellan sulfidhaltig siltig lera och sulfidfri siltig lera (referensproven). För SSJ01 och SSJ03 har pH sjunkit kraftigt och understigit 4 för samtliga reducerade skikt. För REF01 noteras en svag minskning i pH under inkubationstiden, men pH understiger inte gränsvärdet 4.



Figur 8. Svavelhalt [%], pH mätt i fält (pH_{FÄLT}) och pH efter inkubation i 13 veckor (pH_{\mathbb{NK}}) plottat mot djupet [m] för SSJ01A, SSJ01B, SSJ03A, SSJ03B, REF01A och REF01B.

Efter nio veckors inkubation hade vissa prover pH mellan 4,0 och 6,5. Därför fortsattes inkubationen och efter 13 veckor understeg alla reducerade SSJ-prover pH 4 med $\Delta pH \ge 0,5$. En tydlig variation i oxidationshastigheten observerades, då pH i duplikaten sjönk olika snabbt. Detta presenteras för ett urval av proverna i figur 9 nedan. För SSJ01A och SSJ01A dbl följde provernas pH varandra väl tills vecka nio, då pH i duplikatet sjönk snabbare. Det slutgiltiga pH skiljde sig med 0,3 men båda understiger 4. I provet SSJ03B sjönk pH betydligt snabbare än i dess duplikat (SSJ03B dbl), och pH understeg 4 redan efter sju veckor jämfört med 10 veckor. Noterbart är att för proverna SSJ01A och SSJ01A dbl skedde ingen signifikant pH-sänkning mellan veckorna 5–8.



Figur 9. Förändring i pH över tid för SSJ01A 2,2–2,4 m och SSJ03B 1,6–1,8 m i duplikat (dbl). Den horisontella streckade linjen markerar gränsvärdet vid pH 4.

4.3.2 Snabbtest

I tabell 12 nedan presenteras resultat från snabbtest utförda i fält och laboratorium i duplikat (dbl). Ett pH-värde < 3,0 indikerar SSJ. Från snabbtestet i fält indikerade endast prov från SSJ03A och B pH_{FOX1} < 3,0. För snabbtest utfört i laboratorium, indikerade samtliga jordprover för SSJ01 samt SSJ03 pH_{FOX2} < 3,0. Samtliga prover för referensjorden hade betydligt högre pH än gränsvärdet, och pH var generellt högre för pH_{FOX2}.

Provpunkt	Djup (m)	Provnamn	pH _{FOX1}	pH _{FOX2}	
-			(∆рН)	(ДрН)	
SSJ01A	1,8–2,0	SSJ01A	4,1 (4,0)	1,7 (6,4)	
		SSJ01A dbl	4,9 (3,0)	2,1 (5,8)	
	2,0–2,2	SSJ01A	5,5 (2,2)	2,2 (5,5)	
		SSJ01A dbl	4,8 (3,0)	1,5 (6,3)	
	2,2–2,4	SSJ01A	5,5 (2,7)	1,3 (6,9)	
		SSJ01A dbl	dbl 5,6 (2,5) 1,9 (
SSJ01B	1,8–2,0	SSJ01B	5,4 (2,0)	2,0 (5,4)	
		SSJ01B dbl	SJ01B dbl 5,4 (2,1)		
	2,0–2,2	SSJ01B 5,3 (2,3)		2,0 (5,6)	
		SSJ01B dbl 5,1 (2,2)		2,1 (5,2)	
	2,2–2,4	SSJ01B 5,5 (2,4)		2,2 (5,7)	
		SSJ01B dbl	5,5 (2,2)	2,1 (5,6)	
SSJ03A	1,4–1,6	SSJ03A	1,5 (6,3)	1,9 (5,9)	
		SSJ03A dbl	0,9 (6,9)	1,9 (5,9)	
	1,6–1,8	SSJ03A	0,9 (6,8)	1,9 (5,8)	
		SSJ03A dbl 4,2 (3,8)		2,0 (6,0)	
	1,8–2,0	SSJ03A	1,3 (6,5)	1,9 (5,9)	
		SSJ03A dbl	2,4 (5,5)	1,9 (6,0)	
SSJ03B	1,4–1,6	SSJ03B	4,7 (2,8)	2,0 (5,5)	
		SSJ03B dbl	4,7 (3,0)	2,1 (5,6)	
	1,6–1,8	SSJ03B	5,4 (2,3)	2,0 (5,7)	
		SSJ03B dbl	4,3 (3,6)	1,8 (6,1)	
	1,8–2,0	SSJ03B	4,5 (3,2)	2,1 (5,6)	
		SSJ03B dbl	2,4 (5,5)	1,9 (6,0)	
REF01A	1,4–1,6	REF01A	6,2 (1,2)	6,1 (1,4)	
		REF01A dbl 6,3 (1,2)		6,2 (1,3)	
	1,6–1,8	REF01A	EF01A 6,2 (1,4) 7		
		REF01A dbl	REF01A dbl 6,1 (1,5)		
	1,8–2,0	REF01A	EF01A 6,3 (1,4) 7,7 (0)		
		REF01A dbl	ol 6,3 (1,4) 7,7 (0)		
REF01B	1,4–1,6	REF01B	B 6,4 (1,1) 7,6		
		REF01B dbl 6,3 (1,3)		7,0 (0,6)	
	1,6–1,8	REF01B 6,3 (1,4)		7,7 (0)	
		REF01B dbl 6,3 (1,5)		7,4 (0,4)	
	1,8–2,0	REF01B	6,3 (1,4)	7,7 (0)	
		REF01B dbl	6,3 (1,4)	7,3 (0,4)	

Tabell 12. Uppmätt pH efter snabbtest i fält (pH_{FOX1}) respektive laboratorium (pH_{FOX2}), där dbl indikerar duplikat. Värdet i parentes är Δ pH jämfört med pH_{FÄLT} och pH_{FOX1} respektive pH_{FOX2}. Värden som understiger gränsvärdet 3,0 är fetmarkerade.

4.3.3 NAGpH-test

Nedan i tabell 13 presenteras resultat från NAGpH-test. Gränsvärdet för att provet skulle klassas som SSJ var 4,5. Samtliga jordprover från SSJ-profilerna har pH under 4,5. Referensproven påvisar höga pH-värden > 8,9.

Provplats	Provnamn	pH _{FÄLT}	NAGpH
SSJ01	SSJ01A 1,8–2,0	8,0	3,4
	SSJ01B 2,0–2,2	7,5	3,6
SSJ03	SSJ03A 1,6–1,8	7,9	3,2
	SSJ03B 1,8–2,0	7,8	3,1
REF01	REF01A 1,6–1,8	7,6	8,9
	REF01B 1,6–1,8	7,8	9,2

Tabell 13. Resultat från NAGpH-test med pH-värden under gränsvärdet 4,5 fetmarkerade samt pH mätt i fält (pHFÄLT).

4.3.4 Jämförelse av resultat för identifieringsmetoderna

Nedan i tabell 14 jämförs resultaten för de tre undersökta identifieringsmetoderna för det prov från varje jordprofil som analyserades för NAGpH. Ett medelvärde beräknades för duplikaten i inkubationsförsök samt snabbtest. SSJ-proverna understeg gränsvärdena med samtliga metoder förutom för snabbtest i fält.

Tabell 14. Jämförelse av resultat för inkubationsförsök (pH_{INK}), snabbtest i fält och laboratorium (pH_{FOX1} respektive pH_{FOX2}) och NAGpH-test (NAGpH) samt totalhalt svavel. Fetmarkerade värden understiger gränsvärdet presenterat i parentes för klassificering av SSJ.

Provplats	Provnamn	рН _{INK}	pH _{FOX1}	pH _{FOX2}	NAGpH	S (%)
		(4)	(3)	(3)	(4,5)	
SSJ01	SSJ01A 1,8–2,0	3,3	4,5	1,9	3,4	1,52
	SSJ01B 2,0–2,2	3,6	5,2	2,1	3,6	1,46
SSJ03	SSJ03A 1,6–1,8	3,0	2,6	2,0	3,2	1,95
	SSJ03B 1,8–2,0	3,0	3,5	2,0	3,1	1,24
REF01	REF01A 1,6–1,8	7,4	6,2	7,6	8,9	0,0705
	REF01B 1,6–1,8	7,8	6,3	7,6	9,2	0,00922

I figur 10 visualiseras spridning av svavelhalter och pH för de tre identifieringsmetoderna för de reducerade skikten. Spearmans rangkorrelation för S och pH_{INK} var -0,63 (p<0,000038), S och NAGpH var -0,70 (p<0,0242), S och pH_{FOX1} var -0,68 (p<0,0000044) och för S och pH_{FOX2} var -0,65 (p<0,000016). Samtliga metoder indikerar en stark negativ korrelation, att när S ökar, minskar pH och det låga p-värdet påvisar statistisk signifikans.


Figur 10. pH plottat mot total svavelhalt (%) i logaritmisk skala för de reducerade skikten. pH visas för pH_{INK} (efter 13 veckor) NAGpH, pH_{FOX1} samt pH_{FOX2} .

4.4 KLASSIFICERING

Nedan presenteras den sammanställda klassificeringen för de tre reducerade skikten för varje jordprofil (tabell 15). En profil klassades som SSJ om minst ett jordprov från varje profil understeg gränsvärdet. Lägsta uppmätta pH-värden för varje profil för samtliga identifieringsmetoder presenteras, tillsammans med högsta samt lägsta svavelhalten för skikten.

Tabell 15. Sammanställning av resultat för inkubationsförsök (pH_{INK}), snabbtest i fält och laboratorium (pH_{FOX1} respektive pH_{FOX2}) och NAGpH-test (NAGpH) samt total svavelhalt (max- och minvärden). Fetmarkerade värden understiger gränsvärdet presenterat i parentes för klassificering av SSJ.

Parameter	SSJ01A	SSJ01B	SSJ03A	SSJ03B	REF01A	REF01B
рН _{INK} (4)	3,0	3,3	3,0	2,8	7,0	7,5
рН _{FOX1} (3)	4,1	5,1	0,9	2,4	6,1	6,3
рН _{FOX2} (3)	1,3	1,6	1,9	1,8	6	7
NAGpH (4,5)	3,4	3,6	3,2	3,1	8,9	9,2
S (%) max	1,52	1,86	1,95	1,43	0,0705	0,0114
S (%) min	1,25	1,46	1,26	1,24	0,00937	0,00922
Klassificering	SSJ	SSJ	SSJ	SSJ	Ej SSJ	Ej SSJ

Utifrån det svensk-finska klassificeringssystemet (Boman et al. 2023), klassades samtliga jordprofiler för varje 20 cm skikt efter material och sedan efter huvudklass och underklass. Klassificering för alla skikt genom hela profilen för alla djup, visualiseras i figur 11. Oxiderade

zonen för SSJ01A bestod av hyposulfid (Ej SSJ), följt av lager som både var parasulfat och/eller parasulfid (Para-SSJ) i övergångszonen, följt av hypersulfidmaterial i reducerade zonen (SSJ). SSJ01B hade först parahypersulfidmaterial, följt av hyposulfid och sedan likt SSJ01A, parasulfat följt av hypersulfidmaterial. I SSJ03 fanns det parahypersulfid- och parasulfatmaterial direkt (första skiktet hyposulfid för SSJ03B), följt av hypersulfidmaterial (SSJ) från 0,8 m djup. Förekomsten av både parasulfatmaterial samt hypersulfidmaterial, gör att de klassas som sulfatjord utöver SSJ och inte som hypersulfidjord. De klassas också som finkorniga utifrån okulär bedömning samt resultat från kornstorleksanalysen. För REF01 klassades alla prov som Ej SSJ, då 15 av 20 skikt var hyposulfidmaterial. Dessa innehöll mer än 0,01% S, men pH understeg aldrig 4 respektive 4,5. Resterande fem prov var ej sulfidmaterial (S < 0,01%). Se bilaga B.1–B.6 för fullständig bedömning av material i samtliga skikt.



Figur 11. Klassificering av jordprofilerna SSJ01A, SSJ01B, SSJ03A, SSJ03B, REF01A och REF01B enligt Boman et al. 2023.

4.5 LAKTESTER OCH METALLMOBILITET

4.5.1 Geokemiskt aktiv fraktion

Den geokemiskt aktiva fraktionen av ämnena As, Cd, Co, Cr, Ni och Zn (figur 12) beräknades från medelvärdet av duplikaten från extraktion med 0,43M HNO₃. Resultatet från ena duplikatet (dbl) för SSJ01B, användes inte då ett felaktigt värde först rapporterats från ALS Scandinavia. För SSJ01B beräknades därför inget medelvärde utan värdet användes från det andra provet. Fullständiga analysresultat finnes i bilaga C.1.

Referensjorden påvisar större geokemisk aktiv fraktion av samtliga ämnen förutom As. För As varierarar den mellan 3,4 och 7,4 %, och för Cd och Co är den 2 gånger större respektive 3–4 i

REF jämfört med SSJ. För Cr varierar den mellan 4,1 och 5,1 %, för Ni (9,8–15,5) och för Zn (18,5–22,9).



Figur 12. Geokemiskt aktiv fraktion [%] för As, Cd, Co, Cr, Ni och Zn i förhållande till totalhalt för specialprover.

Den geokemiskt aktiva fraktionen för metallerna jämfördes mot fraktionen för pH-steg 1 (den suraste lösningen i pH-beroende laktest). Resultatet visas i figur 13, där det observeras att för As, Co och Ni uppmätts högre halter från pH-steg 1 jämfört med den geokemiskt aktiva fraktionen för SSJ-proverna.



Figur 13. Geokemiskt aktiv fraktion [%] samt fraktion från pH-steg 1 [%] för As, Cd, Co, Cr, Ni och Zn i förhållande till totalhalt för specialprover.

4.5.2 Utlakad fraktion

I figur 14 presenteras utlakningsgraden av As, Cd, Co, Cr, Ni och Zn i opåverkade (reducerade) specialprover med 0,001M CaCl₂. Den utlakade halten uttrycks som en procentandel av totalhalten. Jämförelsen visar att resultaten skiljer sig både mellan SSJ-proverna samt referensen. För samtliga metaller är lakbarheten lägst för referensprovet och för Cr och Zn är det minst skillnad mellan SSJ och REF. SSJ01B har störst utlakning av As och Cr, medan SSJ03A och SSJ03B har högst utlakning av Cd, Co, Ni och Zn.



Figur 14. Utlakad halt av As, Cd, Co, Cr, Ni och Zn [% i lösning] för specialproverna jämfört med totalhalt [mg/kg TS].

4.5.3 Jämförelse av opåverkade och oxiderade specialprover

Nedan i tabell 16 presenteras de olika pH-värdena som uppmättes för specialproverna, både opåverkade och oxiderade i lösning med 0,001M CaCl₂. De oxiderade specialproverna togs efter 9 veckors inkubation från inkubationsförsöket, där oxidationshastigheten varierade för duplikaten. För SSJ-proverna var pH lägre för de oxiderade proverna och under 4, förutom för SSJ01B dbl samt SSJ03B dbl. Referensprovets pH skiljde sig endast med 0,2 respektive 0,3 pH-enheter för opåverkat och oxiderat.

Tabell 16. Uppmätt pH för opåverkat och oxiderat specialprov i duplikat (betecknat som dbl) i 0,001M CaCl2.

Provnamn	pH opåverkat	pH oxiderat	pH oxiderat dbl
SSJ01B	6,9	3,7	5,4
SSJ03A	6,5	3,6	3,9
SSJ03B	6,6	3,7	4,9
REF01B	8,2	7,9	8,0

Specialprovernas buffringskapacitet presenteras nedan i figur 15 med de oxiderade proverna plottade för jämförelse. Jämförelsen mellan opåverkade och oxiderade SSJ-prover visar att oxidationen har lett till en pH-sänkning. För fyra av de proverna motsvarar deras pH det i den

suraste lösningen för opåverkade proverna. För de två övriga motsvarar pH det i den mindre sura lösningen och för REF01B motsvarar oxiderat pH detsamma som i neutral lösning. Referensprovet påvisar en hög buffringskapacitet vid sur lösning och oxidationen påverkar inte denna. SSJ01A, SSJ03A och SSJ03B har betydligt lägre buffringskapacitet än REF01B.



Figur 15. Buffringskapacitet för opåverkade specialprover när bas och syra tillsattes (negativ [OH]/positiv [H⁺]). Buffringskapaciteten för oxiderade prover är insatta i en punkt.

Figur 16 nedan, visar en jämförelse av utlakningshalten för As, Cd, Co, Cr, Ni och Zn i opåverkat specialprov och oxiderat specialprov i duplikat med 0,001M CaCl₂. För referensprovet var metallhalterna betydligt lägre än för SSJ-proverna, särskilt Cd, Co och Ni vars halter är för låga för att synas i grafen (< 0,007 mg/kg TS). Det finns ingen signifikant skillnad mellan halterna i opåverkat och oxiderat prov. För SSJ-proverna utmärker sig As från övriga metaller, då den opåverkade halten är högre än oxiderade. För övriga metaller är de utlakade halterna betydligt högre för oxiderade prover. Variationer i halterna observeras för oxiderat och oxiderat dbl, där pH skillnaderna var stora för SSJ01B samt SSJ03B (se tabell 16).



Figur 16. Jämförelse av utlakad halt av As, Cd, Co, Cr, Ni och Zn [mg/kg TS] för opåverkat specialprov (Red) och oxiderat specialprov (Ox) i duplikat i 0,001M CaCl₂. Dbl betecknar duplikat.

Nedan i figur 17 visualiseras jämförelsen av metallöslighetens pH-beroende för As, Cd, Co, Cr, Ni och Zn mellan oxiderade och opåverkade specialprover. För de opåverkade proverna beräknades medelvärdet av de två duplikaten för de uppmätta koncentrationerna för respektive pH-steg, se bilaga C.2–C.6 för fullständigt analysresultat. pH varierar mellan 3 och 9 för de opåverkade SSJ-proverna och för REF mellan 7 och 11. Generellt har referensjorden betydligt lägre koncentrationer av metallerna än SSJ-proverna. Jämförelsen mellan oxiderat och opåverkat prov avläses genom att metallösligheten för oxiderade prover motsvarar den tredje punkten i figuren räknat från vänster, vilket är koncentrationen vid pH-steg 3 i pH-beroende laktest. Resultatet visas för oxiderade proverna i duplikat, eftersom de efter nio veckors inkubation hade olika pH (se tabell 16). Dessa betecknas som "ox" och "ox dbl" efter provnamnet. För fyra av SSJ-proverna motsvarar oxiderat pH samma pH som i pH-steg 1 för opåverkade specialprover.

För SSJ-proverna är beteendet för Cd, Co, Cr, Ni och Zn konsekvent; metallösligheten av de oxiderade proverna är högre än för opåverkade. Metallösligheten för de oxiderade proverna motsvarar den för opåverkade prover vid samma pH som störst volym syra tillsattes (pH-steg 1). De två proverna som inte fullständigt oxiderat med pH 5,4 och 4,9 följer trendlinjerna med motsvarande metallöslighet vid samma pH för opåverkat prov. Metallösligheten för REF01B liknar den för de opåverkade proven vid det tredje pH-steget, med små variationer. As uppvisar ett avvikande resultat jämfört med övriga metaller. Metallösligheten av As i oxiderade SSJ-proverna är lägre än opåverkade vid samma pH. As och Cr har en ökad löslighet vid både låga pH (under 4) och höga (över 6) med en V-formad kurva. Cd, Co, Ni och Zn är mest lösliga vid låga pH.



Figur 17. Koncentration av As, Cd, Co, Cr, Ni och Zn [µmol/l] i logaritmisk skala som funktion av pH för specialproverna. Punkterna och linjerna visar opåverkade specialprover i 4 pH-steg. De oxiderade specialprovarna i duplikat (dbl) visas som separata trianglar i motsvarande färg som linjerna och punkterna.

4.4 MODELLERING I VISUAL MINTEQ

4.4.1 Katjonbyteskapacitet

Katjonbyteskapaciteten bestämdes med två metoder: utifrån extraktion med 0,43M HNO₃ och jordarnas bulkmineralogi från XRPD-analys. Likartade resultat erhölls för båda metoderna (tabell 17). Den största skillnad observerades för REF01B, där CEC överskattades med XRPD jämfört med HNO₃.

Provnamn	CEC (HNO ₃)	CEC (XRPD)
	[cmol _c /kg]	[cmol _c /kg]
SSJ01B	24,7	21,3
SSJ03A	23,8	-
SSJ03A	20,7	22,8
REF01	15,4	22,3

Tabell 17. CEC beräknat från extraktion med 0,43M HNO3 och utifrån XRPD-analys.

Vid modellering av kobolt och nickels metallöslighet, användes resultat för CEC från extraktion med 0,43M HNO₃. I figur 18 visas den modellerade koncentrationen av Ca och Mg tillsammans med uppmätta värden från pH-beroende laktest. Det finns en relativt god överensstämmelse för Ca med uppmätt data, för REF01B underskattades Ca inledningsvist. Mg underskattades för SSJ-proverna, medan de överskattades för REF01B.



Figur 18. Modellerad koncentration av Ca respektive Mg [mmol/l] vid olika pH jämfört med uppmätta värden från laktest.

Höga R²-värden erhölls för de linjära regressionerna (figur 19) varierande mellan 0,85 och 0,96. Ett undantag var Co i REF01B, där anpassningen var 0,76.



Figur 19. Modellerade värden av Ca och Mg [mmol/l] plottade mot uppmätta värden från pH-beroende laktestet.

4.4.2 Kobolt och nickel

Den modellerade metallösligheten av Co och Ni i Visual MINTEQ visas i figur 20 tillsammans med den uppmätta metallösligheten från pH-beroende laktest. Modellen simulerar lösligheten av Co väl för SSJ-proverna och bäst för SSJ01B och SSJ03A, vilket stödjs av RMSE värdena (tabell 15). Vid det lägsta pH-värdet underskattas lösligheten och är cirka hälften av den uppmätta. REF01B har lågt uppmätta koncentrationer av löst Co som är relativt konstanta vid det höga pH-intervallet. Detta lyckas inte simuleras i modellen. Precis som för Co är modellen bättre anpassad för metallösligheten av Ni för SSJ-proverna och det finns relativt god överrensstämmelse mellan laktest- och modellvärdena. SSJ01B har bäst anpassning och simulerar den kraftiga minskningen vid låga pH väl och sedan den mer gradvisa minskningen vid neutrala och höga pH. För SSJ-proverna underskattar modellen initialt lösligheten, men vid högre pH finns det god överrensstämmelse. Modellen simulerar REF01B sämst för metallösligheten av Ni. Den sämsta anpassningen för metallösligheten av Co och Ni för SSJproverna är SSJ03B. Detta tydliggörs av RMSE (tabell 18).



Figur 20. Modellerad metallöslighet av Co och Ni [µmol/l] vid olika pH jämfört med uppmätta värden från laktest.

Tabell 18. Beräknat RMSE för modelleringen av Co och Ni.

Provnamn	RMSE Co	RMSE Ni
SSJ01B	0,316	0,365
SSJ03A	0,370	0,527
SSJ03B	0,493	0,784
REF01B	0,156	0,085

I figur 21 visas jämförelsen mellan modellerade och uppmätta värden för Co och Ni vid 4 olika pH-steg. Att modellen kan beskriva metallösligheten av Co och Ni för SSJ-proverna bekräftas av de höga R²-värdena nära 1. Vidare bekräftas den sämre anpassningen för REF01B vid höga pH, med en mycket svag korrelation mellan uppmätta och modellerade värden.



Figur 21. Modellerade värden av Co och Ni [µmol/l] plottade mot uppmätta värden från pH-beroende laktestet i 4 pH-steg.

I figur 22 visas de olika kemiska formerna av Co och Ni. Formerna visas för löst form, löst med organiskt material (bundet till DOM), bundet till lera, Fe- och Al-hydr(oxider) (bundet till oxid) och till fast organiskt material (bundet till SOM). Co och Ni förutspåddes att främst finnas som fria joner i löst form vid pH < 4 (> 95%), och även för Co vid pH < 4,8 (> 65%). Vid pH 4,8–7,5 dominerade komplexbildning till organiskt material (55–95%). När pH ökade till över 8, förutspåddes den bundna formen till hydr(oxider) dominera (50–99,9%) för både Co och Ni. Lermineral förväntas binda Co vid pH 4,8–8,2 mellan 1,5 till 8% och för Ni 0,4–4%. Co och Ni bundet till DOC förutspås vara liten och mindre än 1,6%.



Figur 22. Modellerad fördelning av Co (vänster) och Ni (höger) mellan formerna, lösta fria joner (Löst), löst med organiskt material (bundet till DOM), bundet till lera, Fe- och Al-hydr(oxider) (bundet till oxid) och till fast organiskt material (bundet till SOM) för de olika pH-värdena.

5 DISKUSSION

5.1 PROVTAGNING I FÄLT

Fältprovtagningen visade tydliga skillnader mellan sulfidförande leror och sulfidfria leror. Alla profiler klassificerades som siltiga leror eller leror och SSJ-profilerna utmärkte sig med den observerade mörkgråa till svarta färg vid djup under den uppskattade grundvattenytan. Färgen gav en tydlig indikation om att SSJ01A och SSJ03 troligtvis innehöll sulfider. Vidare bekräftades detta av de initiala pH-mätningarna i fält, med lågt pH i oxidationszonen varpå pH ökade kraftigt med djupet från grundvattenytan. Detta indikerade oxidation av sulfider i den övre delen av profilen, följt av en övergångszon samt en reducerad zon. En liknande pH-gradient saknades i referensjordsprofilerna.

5.2 KEMISKA ANALYSER

5.2.1 Totalhalter

Analys av profilernas totalhalter av grundämnen, visade inga signifikanta skillnader för As, Cd, Co, Cr, Ni och Zn mellan SSJ och referens. Däremot obesvarades lägre halter av As, Co, Ni och Zn vid den uppskattade grundvattenytan, vilket tyder på att utlakning har varit störst vid de djupen. I SSJ03 noterades en markant ökning av Ni och Zn strax under grundvattenytan i, vilket kan bero på en sekundär utfällning av mineralen (Haldar 2017).

5.2.2 Svavelhalt

Den analyserade svavelhalten påvisade som förväntat en stor skillnad mellan SSJ-profilerna samt referensen. De lägre halterna ovanför grundvattenytan, indikerar oxidation av sulfider till sulfat och den kraftiga ökningen med djupet indikerar övergångszon och reducerad zon. För referensprovet var den som förväntat låg genom hela den vertikala profilen. Men för de flesta proverna översteg dessa 0,01% (variation mellan 0,001 och 0,07%), vilket gör att REF01A och REF01B klassificeras som hyposulfidmaterial (Boman et al. 2023). Det innebär dock inte att de direkt klassificeras som SSJ, om inte pH_{FÅLT} eller pH_{INK} understiger 4 (Boman et al. 2023). Visuri et al. 2021 har dragit slutsatsen att för finkorniga material är det sannolikt SSJ om svavelhalten är större än 0,2% och troligtvis ej SSJ om S < 0,03%. Utifrån detta har REF01 svavelhalter inom ett intervall där svavelhalt som ensam parameter, inte är tillräcklig för att entydigt identifiera sura sulfatjordar.

Trafikverket använder en tredelad klassificering baserad på svavelhalt: S < 0,1 % (försumbar försurningsrisk), S 0,1–0,4 % (låg till hög försurningsrisk) och S > 0,4 % (mycket hög försurningsrisk) (Trafikverket 2023). Dessa gränsvärden har fastställts för att effektivt hantera stora mängder sur sulfatjord vid schaktning. Enligt denna klassificering skulle REF01 inneha försumbar försurningsrisk, vilket överensstämmer med resultat från samtliga identifieringsmetoder. Vidare skulle också SSJ01A vara i linje med den svensk-finska klassificeringen (figur 11), där de oxiderade skikten har försumbar försurning, följt av ett lager låg till hög försurningsrisk och mycket hög försurningsrisk i de reducerade skikten. Det finns dock skillnader mellan systemet med avseende på, vid vilket djup och hur tjocka dessa skikt är. SSJ01B avviker mer än A, då den enligt Trafikverket (2023) skulle ha försumbar försurningsrisk ner till 1,2 m djup. Inkubationsförsöket visar dock att det förekommer försurande skikt inom det djupet, därför är försurningsrisken högre än vad svavelhalten ensam indikerar. Trafikverket föreslår dock inte att svavelhalt som ensam parameter är tillräcklig. Resultaten i denna rapport bekräftar det, men visar också att svavelhalten tillsammans med pH-mätningar är en viktig parameter och kan ge en bättre helhetsbild av jordarnas försurningspotential.

5.2.3 TOC

Resultaten för TOC visade en betydande skillnad mellan den beräknade metoden och den direkta metoden. TOC_B (beräknat) överskattades kraftigt för samtliga prover. Den beräknade metoden som inte är ackrediterad och utgår från glödgningsförlust kan påverkas av förlust av vatten förutom organiskt material. Vidare antas att organiskt material innehåller 58 % kol, vilket kan vara en förenkling för de undersökta jordarna. Resultatet påvisar att den beräknade metoden inte är lämplig för att bestämma TOC för de undersökta lerjordarna.

5.2.3 XRPD-analys

Från XRPD-analysen påvisades tydliga skillnader i bulkmineralogin för SSJ01, SSJ03 och REF01. Pyrit detekterades endast i SSJ01 och SSJ03 vilket bekräftade att de var sulfidhaltiga. En högre andel pyrit detekterades i SSJ03 jämfört med SSJ01 och ingen kalcit eller aragonit fanns i SSJ03. SSJ03 hade en något lägre buffringskapacitet än SSJ01 och oxidations-hastigheten i inkubationsförsöket var också snabbare. Detta kan således förklaras av avsaknaden av karbonatmineral och mer pyrit i SSJ03.

5.3 IDENTIFIERINGSMETODER

5.3.1 Inkubationsförsök

Inkubationsförsök utfördes i duplikat för samtliga prover. För de flesta proverna skiljde sig inte resultatet med mer än 0,2 pH enheter, vilket är en typisk variation för pH-mätningar i jordprov (Visuri et al. 2021). Inkubationsförsöket gav tillförlitliga resultat för att identifiera de olika jordprofilerna som SSJ eller ej SSJ. Om försiktighetsmått tillämpas vid bedömningen, att endast ett prov från profilen behöver ha pH_{INK} < 4 skulle profilerna SSJ01A, SSJ01B, SSJ03A och SSJ03B identifieras som SSJ efter nio veckor.

Variationer i oxidationshastighet mellan duplikat, vilket visades i figur 9, kan förklaras av skillnader i provtjocklek, inhomogenitet och provets fuktighet. Provtjockleken, trots att den var avsedd att vara 5–10 mm, varierade sannolikt något mellan proverna vilket kan ha påverkat oxidationshastigheten. Detta stöds av tidigare forskning som visat att provtjockleken kan optimeras till 2 mm för att påskynda oxidationsprocessen och avsevärt minska inkubationstiden till 3 veckor för finkorniga jordar (Visuri et al. 2021). Inkubationslådorna var inte helt täta vilket gjorde att proverna lätt torkade ut och behövde vattnas regelbundet. För att simulera den verkliga oxidationen av sulfider ska proverna hållas nära fältkapacitet, och svårigheten under inkubationsprocessen av sulfider är komplex (Edén et al. 2023) och att oxidationshastigheten varierade kan därför bero på detta med minskad mikrobiologisk aktivitet, förändrad porstruktur samt förändrad redoxpotential (Pousette 2010). Inkubationsförsök som identifieringsmetod är tidskrävande och processen behöver ständigt övervakas så att proverna hålls fuktiga.

5.3.2 Snabbtest

Snabbtest i fält visade en begränsad samstämmighet med resultaten i laboratorium för identifiering av SSJ. Endast 6 av SSJ-proverna indikerade SSJ med snabbtest i fält jämfört med samtliga 24 i laboratorium. För proverna som sjönk under gränsvärdet i fält, observerades en tydlig reaktion då de började koka, bubbla och ryka. 19 av 24 prover som sjönk under gränsvärdet i laboratorium påvisade synlig reaktion. Således behöver en tydlig reaktion inte påvisa SSJ. Vid analys av ΔpH observerades ett tydligt samband för de prover som indikerade SSJ, där ΔpH var > 5. Vidare var ΔpH större för SSJ i fält som inte indikerade SSJ jämfört med ΔpH för alla referensprover.

Snabbtest i fält påvisades vara påverkat av väderförhållanden och temperatur. Reaktionens temperaturkänslighet omnämns inte i den finska miljöministeriets vägledningen avseende identifiering av sulfidförande lerjordar (Miljöministeriet 2022). Resultaten i denna studie visade att vid låga temperaturer på cirka 0°C, erhålls inkonsekventa resultat för att korrekt kunna identifiera SSJ jämfört med snabbtest i laboratorium. Dessa resultat stödjer den temperaturkänslighet som beskrivits i Australiens riktlinjer för identifiering av SSJ (Sullivan et al. 2018b). Där belyses även att reaktionstiden kan ta upp till en 1 h i kalla väderförhållanden. I detta examensarbete var dock inte 1 h tillräcklig reaktionstid vid låga temperaturer.

Solen började skina och temperaturen steg under fältarbetet, när snabbtest utfördes för SSJ03A samt B. Då erhölls de resultat som indikerade SSJ, vilket understryker väteperoxidens temperaturberoende och stödjer även rekommendationerna i de australienska riktlinjerna att använda rumstempererad väteperoxid, samt att provrör kan placeras i varmt vatten eller under direkt solljus om ingen reaktion sker (Sullivan et al. 2018b). I en annan rapport har en omgivningstemperatur under 5°C observerats som en gräns för långsammare reaktionshastighet (Visuri et al. 2021).

Snabbtest i fält behöver därför utföras med försiktighet vid kallare temperaturer, då resultaten annars riskerar att bli felaktiga. Snabbtestet som identifieringsmetod av SSJ är därför inte en tillförlitlig metod i fält vid temperaturer runt 0°C. Från resultaten i laboratorium bedöms det vara en tillförlitlig metod, då samtliga SSJ-prover identifierades korrekt och referensproverna som ej SSJ.

5.3.3 NAGpH-test

NAGpH-test identifierade båda profilerna för SSJ01 och SSJ03 som syraproducerande SSJ. pH-värden från NAGpH korrelerade väl med de lägsta pH-värdena uppmätta under inkubationen. Den maximala skillnaden mellan NAGpH och pH_{INK} var 0,2, vilket tyder på att metoden likt inkubationsförsök väl simulerar den naturliga försurningen. Däremot uppvisade REF01 betydligt högre NAGpH jämfört med pH_{INK} med skillnaderna 1,5 respektive 1,4. Detta kan bero på att den detekterade kalciten i provet, snabbt neutraliserat väteperoxiden. Reaktionstiden för NAGpH-test är betydligt kortare jämfört med reaktionstiden för inkubationsförsök. NAGpH-test orsakar en intensivare oxidation än vid inkubation, vilket kan leda till reaktioner som inte sker under naturliga förhållanden. Antalet prover som testades med NAGpH var begränsat, vilket gör det svårt att dra generella slutsatser i detta arbete. Men överenstämmelsen från resultatet för SSJ jämfört med referensproverna, styrker ändå att dessa jordar identifierades korrekt med NAGpH. En begränsning med metoden likt för snabbtest är om jordproverna har TOC högre än 5–7 %. Detta kan leda till felaktiga resultat då väteperoxiden också reagerar med organiskt material och kan bilda organiska syror (Amira 2002). De undersökta proverna hade TOC mellan 0,9 och 3,23 %, vilket är inom ett intervall där metoden anses vara lämplig.

5.3.4 Jämförelse av identifieringsmetoder

Det finns en god samstämmighet mellan resultaten från snabbtest i laboratorium, inkubationsförsök och NAGpH för att identifiera SSJ. Referensproverna med låg svavelhalt < 0,1 %, har betydligt högre pH-värden och över gränsvärdena, för alla identifieringsmetoder. Detta indikerar att ingen av metoderna ger falskt positiva resultat. Med Spearmans rangkorrelation utvärderades sambandet för totalhalt svavel i de reducerade skikten och de olika pH-värdena för inkubationsförsök, snabbtest samt NAGpH. Resultatet varierade mellan -0,63 och -0,70, vilket påvisade en stark negativ korrelation och samtliga korrelationer var statistiskt signifikanta.

Inkubationsförsök motsvarar bäst den pH-sänkning som naturligt sker vid oxidation. Således erhålls en realistisk bild av försurningspotentialen. Metoden är dock tidskrävande, vilket gör den mindre lämplig när SSJ snabbt behöver identifieras. Trots begränsningarna för snabbtest gällande temperatur och för jordar med högt organiskt innehåll (GF > 20 %), kan det vara en användbar identifieringsmetod. Tillförlitligheten för identifiering av SSJ med snabbtest skulle därför förbättras om den kombineras med analys av S och organiskt material. Fördelen med snabbtest är att det är en enkel och tidseffektiv metod, då den kan utföras direkt ute i fält eller på laboratorium. Det krävs en liten mängd provmaterial och resultat erhålls efter endast 1 h. Snabbtest kan vara ett användbart verktyg för preliminära undersökningar och vid screening av stora områden. Således en lämplig metod för stora infrastrukturprojekt där omfattande jordmassor behöver identifieras. Tillförlitligheten av NAGpH-testen begränsas precis som snabbtest av hög halt organiskt material. Resultaten i detta arbete påvisade att metoden var tillförlitlig och överensstämde väl för SSJ med pH_{INK}. Liknande resultat har erhållits av Ilonen (2021). Metoden kräver dock analys av ett externt laboratorium, vilket i dagsläget inte utförs för jordprover utan endast bergmaterial.

Trafikverket (2023) föreslår ett identifieringssystem baserat på försurningspotential, med analys av halter av S, Fe och Ca samt pH(init) uppmätt direkt och efter 24 h luftning pH(ox). pH-mätningar efter 24 h luftning, ger inte en realistisk bild av försurningspotentialen av SSJ bestående av främst pyrit. Pyrit oxiderar långsammare än monosulfider (Boman et al. 2010), vilket har noterats i detta examensarbete, då det tog det flera veckor för pH att understiga 4,3. För likande jordar bestående av främst pyrit som undersökts i detta arbete skulle snabbtest bättre och mer tillförlitligt kunna indikera SSJ än pH efter 24 h luftning. Således för att förbättra identifieringen av SSJ som domineras av pyrit i södra Sverige (Becher et al. 2019), bör det övervägas om snabbtest eller NAGpH ger bättre uppskattningar av försurningspotentialen än pH(ox) efter 24 h luftning.

5.4 KLASSIFICERING AV SULFIDJORD

Inga skikt hade pH_{FÅLT} under 4, således förekom det inte sulfatmaterial. Däremot påvisades skikt i SSJ01 och SSJ03 vara parasulfat samt parasulfid i oxiderade och övergångszonen. Hypersulfid förekom i den reducerade zonen för samtliga SSJ-profiler. Då skikt av både parasulfat, parahypersulfid samt hypersulfid fanns, klassades profilerna som SSJ och mer specifikt som sulfatjord (aktiv). Detta då de har en direkt försurande effekt och inte endast en potentiell försurande påverkan. Vidare kategoriserades de som finkornig SSJ baserat på kornstorleksfördelningen. Finkornig sur sulfatjord bedöms vara den mest försurade jordtypen (Sundström et al. 2002). Referensprofilerna klassades som ej SSJ till följd av att ingen försurningspotential påvisades i inkubationsförsöket med pH_{INK} > 4,6.

En mätosäkerhet på cirka 0,1–0,2 pH-enheter noterades vid inkubationsförsöket som genomfördes i duplikat för alla skikt. Dessa små skillnader påverkade bedömningen av vissa skikt främst i övergångszonen, men även oxiderade zonen. Skikten klassades som parasulfat om $\Delta pH < 0,5$ och pH_{INK} mellan 4 och 4,5 eller direkt som parasulfat om pH_{FÅLT} var 4–4,5, däremot som parahypersulfid om $\Delta pH \ge 0,5$. Vidare är det endast 0,1 pH-enheter mellan klassificering för hyposulfid och parahypersulfid, vilket till följd av mätosäkerheten försvårar bedömningen. Enligt bedömningssystemet klassades de två översta skikten för SSJ01B som parahypersulfid. Det är dock troligt att den uppmätta svavelhalten på cirka 0,06 % främst förekommer i sulfatform och inte sulfidform, eftersom skiktet är beläget nära ytan och långt över grundvattenytan borde eventuella sulfider redan ha oxiderat. Avståndet mellan provpunkterna A och B var endast 26 m, men ändå uppvisade de olika resultat för de övre skikten. Detta understryker att det förekommer lokala variationer som påverkar bedömningen av de olika materialen i SSJ. I detta projekt som fokuserat på att identifiera sura sulfatjordar, är det inte avgörande om några enskilda skikt klassificeras som parasulfat eller parahypersulfid, då denna distinktion blir mer relevant vid en detaljerad riskbedömning.

5.5 METALLMOBILITET

Referensjorden påvisade en större geokemisk aktiv fraktion av metallerna Cd, Co, Cr, Ni och Zn och största skillnaden var för Cd, Co och Ni jämfört med SSJ-proverna. Extraktionen med 0,43M HNO₃ utfördes på fuktiga prover, alltså opåverkade av oxidation och reducerade innan försöket. Eftersom Co och Ni förekommer som sulfider (Åström 1998), är det troligt att dessa metaller inte hann lösas upp fullständigt under den korta extraktionstiden på 2 timmar. Detta förklarar varför det uppmättes högre koncentrationer av As, Co och Ni från det pH-beroende laktestet (pH-steg 1) med en längre extraktionstid på 5 dygn. Denna lösning var dock mindre sur (tillsats av 0,03M HNO₃) jämfört med 0,43M HNO₃. Resultaten påvisar att extraktionstiden var mer avgörande än surheten i lösningen, för att frigöra As, Co och Ni från sulfidmineralen. Följaktligen underskattades den geokemiskt aktiva fraktionen av As, Co och Ni för SSJ-proverna.

Den utlakade fraktionen av metallerna som lakas ut ur specialproverna vid 0,001M CaCl₂ (figur 14), visade att från SSJ lakas en högre andel metaller ut jämfört med referensen. Detta påvisar en ökad risk av mobilisering av metallerna As, Cd, Co, Cr, Ni och Zn från SSJ. För ämnena Cr

och Zn var utlakade halter relativt jämna mellan SSJ och referens. Totalhalterna påvisade inga stora skillnader mellan referens och SSJ, så därför har inte detta påverkat den utlakade halten.

5.5.1 Jämförelse av metallöslighet mellan opåverkat och oxiderat prov

I figur 16 presenterades resultaten för utlakad halt av As, Cd, Co, Cr, Ni och Zn i neutral lösning som representerade det naturliga porvattnet (Elert et al. 2006). Utlakade halter för referensprovet var låga och påvisade ingen signifikant skillnad mellan opåverkat och oxiderat prov, vilket var förväntat då inga sulfider oxiderades. As utmärkte sig från övriga metaller, då en större metallöslighet påvisades i opåverkade SSJ-prov. Detta stämmer dock med teorin om att lösligheten ökar vid alkaliska förhållanden, då As främst förkommer i anjonisk form (Berggren Kleja et al. 2006). För övriga metaller var metallösligheten signifikant högre i oxiderade prover. Detta tyder på att försurningen till följt av oxidation av sulfider är den dominerande faktorn för metallösligheten. Jämförelsen mellan oxiderade duplikat visade en god överenstämmelse för SSJ03A, där skillnaden i uppmätta pH i lösningen var minst (3,7 respektive 3,9). För SSJ01B och SSJ03B var skillnaderna i utlakade halter betydande (pH varierade med mer än 1,2 för duplikaten), vilket understryker metallöslighetens pH-beroende. Utlakningen var således störst för de oxiderade proverna med lägst pH.

Det pH-beroende laktestet för opåverkade (reducerade) prover visade att metallerna i SSJproverna hade högre metallmobilitet jämfört med referensen. Då referensprovet inte kom ner i lägre pH än 7,4, tyder det på en högre buffringskapacitet jämfört med SSJ. Generellt för de studerade metallerna gäller att vid låga pH ökar metallösligheten och således rörligheten i marken. Att metallösligheten ökade vid låga pH beror på att mindre mängd adsorberas till järnoch aluminium(hydr)oxider, organiskt material samt lerpartiklar. Sedan påvisades en svag ökning av metallösligheten för Cd, Co, Ni och Zn vid pH > 7, vilket avviker från den minskande trenden. Detta kan förklaras av att adsorptionen minskar vid mer alkaliska förhållanden, då metallerna i större utsträckning komplexbinds till löst organiskt material (Berggren Kleja et al. 2006). Dessa komplexbildningar är mer betydande vid högt pH, då koncentrationen DOC ökar (Dijkstra et al. 2004). As och Cr uppvisar ett mer komplext pH-beroende med en tydligare Vformad kurva, där lösligheten är som störst både vid låga pH samt höga pH. Enligt teorin adsorberas As starkt till järn- och aluminium(hydr)oxider vid pH < 8 och pH < 6 för Cr (Berggren Kleja et al. 2006), vilket förklarar den ökade metallösligheten vid höga pH. Den höga lösligheten vid låga pH beror troligtvis på upplösning av järn- och aluminium(hydr)oxider som följaktligen frigör As (Bayard et al. 2006).

Vid jämförelse av opåverkade och oxiderade specialprover i förhållande till det pH-beroende laktestet, var metallösligheten starkt pH-beroende. Den oxiderade metallösligheten var inte signifikant högre eller lägre än motsvarande vid samma pH för opåverkat prov. Således var lösligheten konsekvent vid jämförbara pH-nivåer för metallerna Cd, Co, Cr, Ni och Zn. Metallösligheten i sura sulfatjordar påverkas av sulfidoxidationen och försurningen. De två oxiderade proverna som inte fullständigt oxiderat (pH 5,4 respektive 4,9), följde trendlinjerna väl, vilket förstärker att lösligheten styrs av pH-sänkningen i sura sulfatjordar. För As var lösligheten lägre för oxiderade SSJ-prover, vilket förklaras av att As i stor utsträckning var bundet till järn- och aluminium(hydr)oxider. I lösning med HNO₃ löstes dock dessa upp och en högre metallöslighet påvisades därför för opåverkat prov.

5.6 MODELLERING I VISUAL MINTEQ

5.6.1 Katjonbyteskapacitet

Katjonbyteskapaciteten för specialproven uppskattades med två olika metoder: dels utifrån koncentrationerna från extraktion med 0,43M HNO₃ och utifrån jordens bulkmineralogi (XRPD). Detta behövdes som indata till modelleringen för Co och Ni metallöslighet i Visual MINTEQ, då det styr mängden katjoner som binds till marken. Resultaten visade att CEC från de två metoderna överensstämde väl för SSJ-proverna. Den största skillnaden noterades för REF01, där den var högre med XRPD, vilket kan bero på en högre andel smektit i det provet. För flera av mineralen och organiskt material, var intervallen för typiska CEC-värden stora och därför användes medianvärden. Om minimi- eller maxvärden hade använts, skulle CEC blivit avsevärt lägre respektive högre. CEC uppskattat med 0,43M HNO₃ tillämpades i Visual MINTEQ, eftersom det fanns data för samtliga specialprover och även för fördelningen mellan Ca²⁺, Mg²⁺, K⁺ och Na⁺. Modelleringen visade att koncentrationerna Ca överensstämde relativt väl med uppmätt data för SSJ-proverna. Dock underskattades Mg för SSJ-proverna, medan de överskattades för referensprovet.

5.6.2 Kobolt och nickel

Visual MINTEQ kunde beskriva lösligheten av Co och Ni för SSJ-proverna väl. Indata för Co och Ni i modellen var den uppmätta geokemiskt aktiva fraktionen. I figur 13 visades dock att denna koncentration var betydligt lägre än den som uppmättes vid pH-steg 1 från pH-beroende laktest. Detta resulterade i att modellen underskattade lösligheten av Co och Ni vid låga pH, till följd av att för låga koncentrationer användes som indata. Därmed kunde inte en god anpassning erhållas vid det lägsta pH-värdet. För SSJ-proverna fanns det en stark positiv korrelation mellan modellerade och uppmätta värden. Detta indikerade att modellen kunde beskriva de grundläggande processerna som styr metallösligheten. De styrande processerna var komplexbildning till fast organiskt material vid pH 4,8–7,5, och vid pH > 7,5 ytkomplexbildning till Feoch Al-hydr(oxider). RMSE användes för att kvantifiera hur väl modellen simulerar metallösligheten. RMSE visade att modellen lyckades beskriva metallösligheten för både Co och Ni bäst för SSJ01B och sämst för SSJ03B.

För referensprovet med ett smalare och högt pH-intervall, var modellens prediktiva förmåga sämre för både Co och Ni. RMSE för REF01B och Co var 0,156, vilket var lägre än för SSJ03B (0,493). Koncentrationsintervallet för referensprovet var dock mycket smalare, vilket innebär att det absoluta felet är förhållandevis litet, men det relativa felet är större än för SSJ03B. Korrelationen är vidare mycket svag för REF01B, vilket tyder på att modellen inte kan beskriva metallösligheten för dessa lerjordar med hög buffringskapacitet. Bindningen av Co och Ni till marken underskattas och till följd så överskattas lösligheten, trots att modellen simulerar en hög grad adsorption (98,7–99,9 % för Co och 92,5–99,8 % för Ni) vid pH 7,4–8,2.

Den sämre anpassningen för referensprovet påverkas av det höga pH-intervallet jämfört med pH-intervallet för SSJ. Komplexbildningen till (hydr)oxider är mer betydande vid höga pH,

vilket främst påverkar referensjorden. Data för Al³⁺ och Fe³⁺ från extraktion med 0,43M HNO₃ kan ha varit otillräcklig för att användas som indata till modellen. Vanligtvis bestäms Al³⁺ och Fe³⁺ med oxalatlösning (Rennert et al. 2021). Extraktion med 0,43M HNO₃, ger den geokemiskt aktiva fraktionen, vilket innebär att en större mängd förmodligen extraheras än endast den bunden till (hydr)oxider. Således borde inte detta vara en större felkälla till den dåliga anpassningen, då lösligheten ändå underskattas. Detta tyder på att fler parametrar än de som använts i modellen påverkar den starka bindningen till lerjorden. I modellen togs det inte hänsyn till Mn-(hydr)oxider, silikatmineral eller kalcit. Dessa parametrar skulle eventuellt kunna ge en bättre anpassning om de användes som indata till modellen.

6 SLUTSATSER

Inkubationsförsök visade en hög tillförlitlighet för identifiering av sura sulfatjordar. Samtliga prover i de reducerade skikten från SSJ01 och SSJ03 identifierades som sura sulfatjordar med pH_{INK} < 4. Variationer förekom i oxidationshastighet för duplikaten, men de slutgiltiga pH_{INK} erhölls utan signifikanta skillnader över tid (13 veckor). Referensjorden identifierade som ej sura sulfatjordar och lägsta uppmätta pH_{INK} var 5,5 i de översta skikten av profilerna.

Snabbtest utfört i fält uppvisade ett starkt temperaturberoende för oxidationsmedlet väteperoxid. Vid 0°C erhölls inkonsekventa resultat för identifiering av sura sulfatjordar. Förekomsten av sura sulfatjordar underskattades, då endast 6 av 24 prover identifierades korrekt som sura sulfatjordar i fält. Detta resulterade i lägre tillförlitlighet för metoden, jämfört med snabbtest utfört i laboratorium. Under kontrollerade förhållanden i laboratorium visade snabbtest hög tillförlitlighet för identifiering av sura sulfatjordar. Samtliga 24 prover identifierades som sura sulfatjordar. Snabbtest som identifieringsmetod är därför begränsad vid kallare temperaturer, och för att säkerställa tillförlitliga resultat bör den utföras under kontrollerade förhållanden i laboratorium eller med försiktighet vid temperaturer kring 0°C.

NAGpH-testen utfördes för färre prov än snabbtest och inkubationsförsök, men visade en hög tillförlitlighet för de analyserade proverna. Metoden identifierade de fyra SSJ-proverna som sura sulfatjordar och visade en god korrelation med pH_{INK}. Detta indikerar att den likt inkubationsförsöket återspeglar den naturliga försurningen väl.

Ytterligare en begränsning för snabbtest och NAGpH-test är för högorganiska jordar, då oxidationen av organiskt material konsumerar väteperoxiden. Tillförlitligheten för metoderna förbättras därför med kombinerad analys av S och TOC. Valet av identifieringsmetod bör därför baseras på ett projekts specifika krav och jordens egenskaper. För större infrastrukturprojekt då en snabb och inledande bedömning krävs, kan snabbtest vara en lämplig identifieringsmetod.

Vid oxidation av reducerad sulfidjord ökade metallösligheten för metallerna Cd, Co, Cr, Ni och Zn. Den ökade metallösligheten styrs av pH-sänkningen till följd av sulfidoxidation. Metallösligheten för oxiderade prover överensstämde väl med metallösligheten för opåverkade (reducerade) prover när stark syra tillsattes och pH-värdena var jämförbara. Den ökade metallösligheten i sura sulfatjordar bedöms främst bero på försurningen och är starkt pHberoende. As avvek från övriga metaller och blev mer löslig under alkaliska förhållanden, vilket innebar att metallösligheten var störst för opåverkat prov. Resultaten påvisar att utlakning av Cd, Co, Cr, Ni och Zn, är problematisk för sura sulfatjordar då oxidationen leder till högre metallöslighet.

Med den geokemiska modellen Visual MINTEQ beskrevs lösligheten väl för Co och Ni i sura sulfatjordar för olika pH. Vid låga pH underskattades dock metallösligheten, vilket berodde på att för låga koncentrationer av Co och Ni användes som indata. Modellen lyckades beskriva de dominerande processerna som styr lösligheten, vilket var komplexbildning till fast organiskt material samt järn- och aluminium(hydr)oxider. Bindning till lermineral och löst organiskt

material var mindre betydande för metallösligheten. De modellerade värdena korrelerade starkt till uppmätta värden. Dock kunde modellen inte beskriva lösligheten för referensjorden under alkaliska förhållanden. Lösligheten överskattades och modellen kunde inte simulera den starka bindningen till lerjorden.

REFERENSER

- Amira. (2002). ARD Test Handbook. Project P387A. Prediction and Kinetic Control of Acid Mine Drainage. AMIRA International Limited, Melbourne, Australia.
- Appelo, C. A. J., & Postma, D. (2004). Geochemistry, groundwater and pollution. CRC press.
- Bayard, C., & Mood, L. K. (2014). Förekomsten av sura sulfatjordar i Mälardalen en pilotstudie utförd åt SGU. Uppsala universitet, Institutionen för geovetenskaper.
- Bayard, R., Chatain, V., Gachet, C., Troadec, A., & Gourdon, R. (2006). Mobilisation of arsenic from a mining soil in batch slurry experiments under bio-oxidative conditions. *Water Research*. 40(6), 1240–1248. <u>https://doi.org/10.1016/J.WATRES.2006.01.025</u>
- Becher, M., Sohlenius, G., & Öhrling, C. (2019). Sur sulfatjord egenskaper och utbredning. https://www.sgu.se/globalassets/vagledning2/vatmarksatgarder/sgu-2019-sursulfatjord---egenskaper-och-utbredning.pdf
- Berggren Kleja, D., Elert, M., Gustafsson, J.P., Jarvis, N., & Norrström, A.C. (2006). *Metallers mobilitet i mark*. (Rapport 5536). Naturvårdsverket. <u>https://urn.kb.se/resolve?urn=urn:nbn:se:kth:diva-53359</u>
- Bergström, J. (2023). THE FIRST ACTIVE ACID SULFATE SOIL FOUND OUTSIDE THE BALTIC BASIN, IN VISKA VALLEY WEST COAST OF SWEDEN. Göteborgs universitet, Institutionen för geovetenskaper. <u>https://hdl.handle.net/2077/78536</u>
- Boman, A., Fröjdö, S., Backlund, K., & Åström, M. E. (2010). Impact of isostatic land uplift and artificial drainage on oxidation of brackish-water sediments rich in metastable iron sulfide. *Geochimica et Cosmochimica Acta*. 74(4), 1268–1281. https://doi.org/10.1016/J.GCA.2009.11.026
- Boman, A., Mattbäck, S., Becher, M., Yli-Halla, M., Sohlenius, G., Auri, J., Öhrling, C., Liwata-Kenttälä, P., & Edén, P. (2023). Classification of acid sulfate soils and soil materials in Finland and Sweden: Re-introduction of para-acid sulfate soils. *Bulletin of the Geological Society of Finland*. 95(2), 161–186. <u>https://doi.org/10.17741/bgsf/95.2.004</u>
- Creeper, N., Fitzpatrick, R., & Shand, & P. (2012). A simplified incubation method using chip-trays as incubation vessels to identify sulphidic materials in acid sulphate soils. <u>https://doi.org/10.1111/j.1475-2743.2012.00422.x</u>
- Dent, D. L., & Pons, L. J. (1995). A world perspective on acid sulphate soils. *Geoderma*. 67(3–4), 263–276. <u>https://doi.org/10.1016/0016-7061(95)00013-E</u>
- Dijkstra, J. J., Meeussen, J. C. L., & Comans, R. N. J. (2004). Leaching of heavy metals from contaminated soils: An experimental and modeling study. *Environmental Science and Technology*. 38(16), 4390–4395. <u>https://doi.org/10.1021/es049885v</u>
- Edén, P., Boman, A., Mattbäck, S., Auri, J., Yli-Halla, M., & Österholm, P. (2023). Mapping, impacts, characterization and extent of acid sulfate soils in Finland. *Bulletin of the Geological Society of Finland*. 95(2), 135–160. https://doi.org/10.17741/bgsf/95.2.003

- Elert, M., Fanger, G., Höglund, L.O., Jones, C., Suer, P., Wadstein, E., Bjerre-Hansen, J., Groen, C. (2006). *Laktester för riskbedömning av förorenade områden*. (Rapport 5535). Naturvårdsverket.
 https://www.naturvardsverket.se/globalassets/media/publikationer- pdf/ovrigapub/hallbar-sanering/riskbedomning/620-5535-6.pdf [24-08-10]
- Eriksson, J., Dahlin, S., Nilsson, I. & Simonsson, M. (2011). *Marklära*. Upplaga 1:6. Studentlitteratur.
- Erixon, P. (2009). *Klimatstyrda sulfidoxidationer som orsak till surhet och höga metallhalter i vattendrag i norra Sverige*. Luleå tekniska universitet. <u>https://www.lansstyrelsen.se/publikation?entry=_2009__14&context=31</u>
- Fältmarsch, R., Åström M & Vuori, K.-M. (2008). Environmental risks of metals mobilised from acid sulphate soils in Finland: a literature review. *Boreal Environment Research.* 13. 444-456.
- Gustafsson, J.P. (2022). Visual MINTEQ 4.0 user guide. VM_UserGuide40 [24-06-10]
- Gustafsson, J.P., & Antelo, J. (2022). Competitive phosphate and arsenate adsorption on ferrihydrite as described by the CD-MUSIC model. ACS Earth Space Chem. 6(5), 1397-1406. <u>https://doi.org/10.1021/acsearthspacechem.2c00081</u>
- Gustafsson, J.P., Elert, M., Berggren Kleja, D., & Jarvis, N. (2007). *Modeller för spridning av metaller från mark till vatten*. (Rapport 5741). Naturvårdsverket. <u>https://www.diva-portal.org/smash/get/diva2:1630492/FULLTEXT01.pdf</u>
- Haldar, S. K. (2017). Genetic Model: PGE–Nickel–Chromium. *Platinum-Nickel-Chromium* Deposits. Elsevier. <u>https://doi.org/10.1016/B978-0-12-802041-8.00009-2</u>
- Hodson, T. O. (2022). Root-mean-square error (RMSE) or mean absolute error (MAE): when to use them or not. *Geoscientific Model Development*. 15(14), 5481–5487. https://doi.org/10.5194/GMD-15-5481-2022
- Ilonen, E. (2021). Happamien sulfaattimaiden hapettuminen, Reaktioihin vaikuttavat tekijät, tutkimusmenetelmät ja ympäristöriskien hallinta. (Examensarbete) LABammattikorkeakoulu. <u>https://urn.fi/URN:NBN:fi:amk-2021091117693</u>
- Larsson, R. (2008). *Jords egenskaper*. Statens geotekniska institut. https://www.sgi.se/globalassets/publikationer/info/pdf/sgi-i1.pdf [24-06-14]
- Ljung, K., Maley, F., Cook, A., & Weinstein, P. (2009). Acid sulfate soils and human health—A Millennium Ecosystem Assessment. *Environment International*. 35(8), 1234–1242. <u>https://doi.org/10.1016/J.ENVINT.2009.07.002</u>
- Mattbäck, S., Boman, A., Sandfält, A., & Österholm, P. (2022). Leaching of acid generating materials and elements from coarse- and fine-grained acid sulfate soil materials. *Journal of Geochemical Exploration*. 232, 106880. <u>https://doi.org/10.1016/J.GEXPLO.2021.106880</u>
- Michael, P., Fitzpatrick, R., Reid, R. (2017). Effects of live wetland plant macrophytes on acidification, redox potential and sulphate content in acid sulphate soils. *Soil* Use and Management. 33. <u>https://doi.org/10.1111/sum.12362</u>
- Miljöministeriet (2022). Nationell guide om byggnadsprojekt på sura sulfatjordar: Guide för beaktande av sura sulfatjordar och hantering av effekter. Miljödepartementets publikationer 2022:3. <u>https://urn.fi/URN:ISBN:978-952-361-222-8</u>

Nyman, A., Johnson, A., Yu, C., Sohlenius, G., Becher, M., Dopson, M., & Åström, M. (2023). A nationwide acid sulfate soil study - A rapid and cost-efficient approach for characterizing large-scale features. *Science of The Total Environment.* 869, 161845. <u>https://doi.org/10.1016/J.SCITOTENV.2023.161845</u>

- Pousette, K. (2010). *Miljöteknisk bedömning och hantering av sulfidjordsmassor*. Forskningsrapport, Luleå tekniska universitet. Institutionen för samhällsbyggnad och naturresurser.
- Rennert, T., Dietel, J., Heilek, S., Dohrmann, R., & Mansfeldt, T. (2021). Assessing poorly crystalline and mineral-organic species by extracting Al, Fe, Mn, and Si using (citrate-) ascorbate and oxalate. *Geoderma*. 397, 115095. https://doi.org/10.1016/J.GEODERMA.2021.115095
- Sohlenius, G., & Öborn, I. (2004). Geochemistry and partitioning of trace metals in acid sulphate soils in Sweden and Finland before and after sulphide oxidation. *Geoderma*, 122(2–4), 167–175. https://doi.org/10.1016/J.GEODERMA.2004.01.006
- Stendahl, Johan. (2024). Katjonbyteskapacitet och basmättnadsgrad. <u>https://www.slu.se/institutioner/mark-</u> <u>miljo/miljoanalys/markinfo/markkemi/katjonbyteskapacitet-och-</u> <u>basmattnadsgrad/</u> [2024-08-10]
- Sullivan, L. A., Fitzpatrick, R. W., Bush, R. T., Burton, E. D., Shand, P. & Ward, N. J. (2010). *The classification of acid sulfate soil materials: further modifications*. Southern Cross GeoScience Technical Report. 310. Southern Cross University, Lismore, NSW, Australia.

http://www.nrcs.usda.gov/Internet/FSE_DOCUMENTS/nrcs142p2_051509.pdf

- Sullivan, L., Ward, N., Toppler, N. & Lancaster, G. (2018a). National Acid Sulfate Soils Guidance: National acid identification and laboratory methods manual. Department of Agriculture and Water Resources, Canberra, ACT. CC BY 4.0. <u>https://www.waterquality.gov.au/sites/default/files/documents/identificationlaboratory-methods.pdf</u>
- Sullivan, L., Ward, N, Toppler, N. & Lancaster, G. (2018b) National Acid Sulfate Soils guidance: National acid sulfate soils sampling and identification methods manual. Department of Agriculture and Water Resources, Canberra ACT. CC BY 4.0.

https://www.waterquality.gov.au/sites/default/files/documents/samplingidentification-methods_1.pdf

- Sundström, R., Åström, M., & Österholm, P. (2002). Comparison of the metal content in acid sulfate soil runoff and industrial effluents in Finland. *Environmental Science* and Technology. 36(20), 4269–4272. https://pubs.acs.org/doi/full/10.1021/es020022g
- Sveriges Geologiska Institution (SGU). (2024). Acid sulfate soils map viewer. Sweden: Geological Survey of Sweden. <u>https://apps.sgu.se/kartvisare/kartvisare-sur-sulfatjord.html</u>

- Tiberg, C., Kumpiene, J., Gustafsson, J. P., Marsz, A., Persson, I., Mench, M., & Kleja, D. B. (2016). Immobilization of Cu and As in two contaminated soils with zero-valent iron – Long-term performance and mechanisms. *Applied Geochemistry*. 67, 144–152. https://doi.org/10.1016/J.APGEOCHEM.2016.02.009
- Toivonen, J., & Boman, A. (2024). Discharge of potentially toxic elements from acid sulfate soils in western Finland: Conflict between water protection and land use? *Regional Studies in Marine Science*. 71, 103426. https://doi.org/10.1016/J.RSMA.2024.103426
- Toivonen, J., Hudd, R., Nystrand, M., & Österholm, P. (2020). Climatic effects on water quality in areas with acid sulfate soils with commensurable consequences on the reproduction of burbot (Lota lota L.). *Environmental Geochemistry and Health*. 42(10), 3141–3156. <u>https://doi.org/10.1007/s10653-020-00550-1</u>
- Trafikverket (2023). *Effektiv bedömning och hantering av sulfidjordar*. 2023:219. <u>https://urn.kb.se/resolve?urn=urn:nbn:se:trafikverket:diva-15948</u>
- Visuri, M., Nystrand, M., Auri, J., Österholm, P., Nilivaara, R., Boman, A., Räisänen, J., Mattbäck, S., Korhonen, A., & Ihme, R. (2021). Maastokäyttöisten tunnistusmenetelmien kehittäminen happamille sulfaattimaille. Tunnistushankkeen loppuraportti. <u>http://hdl.handle.net/10138/336344</u>
- Westberg, V. (toim), Bonde, A., Haldin, L., Koivisto, A.-M., Mäensivu, M., Mäkinen, M., & Teppo, A. (2016). Vesien tila hyväksi yhdessä : Kokemäenjoen-Saaristomeren-Selkämeren vesienhoitoalueen vesienhoitosuunnitelma vuosiksi. 2016–2021. https://www.doria.fi/handle/10024/123563
- Yli-Halla, M., Virtanen, S., Regina, K., Österholm, P., Ehnvall, B., & Uusi-Kämppä, J. (2020). Nitrogen stocks and flows in an acid sulfate soil. *Environmental Monitoring and Assessment*. 192(12), 1–20. <u>https://doi.org/10.1007/s10661-020-08697-1</u>
- Åbjörnsson, K., Stenberg, M., & Sohlenius, G. (2018). *Järn-och aluminiumurlakningar från invallningar–en undersökning av tre områden i Skåne*. Skåne: Länsstyrelsen.
- Åström, M. (1998). Partitioning of transition metals in oxidised and reduced zones of sulphide-bearing fine-grained sediments. *Applied Geochemistry*. 13(5), 607– 617. https://doi.org/10.1016/S0883-2927(97)00093-0
- Åström, M. E., Yu, C., Peltola, P., Reynolds, J. K., Österholm, P., Nystrand, M. I., Augustsson, A., Virtasalo, J. J., Nordmyr, L., & Ojala, A. E. K. (2018). Sources, transport and sinks of beryllium in a coastal landscape affected by acidic soils. *Geochimica et Cosmochimica Acta*. 232, 288–302. <u>https://doi.org/10.1016/J.GCA.2018.04.025</u>
- Åström, M., & Corin, N. (2000). Abundance, sources and speciation of trace elements in humus-rich streams affected by acid sulphate soils. *Aquatic Geochemistry*. 6(3), 367–383. <u>https://doi.org/10.1023/A:1009658231768</u>
- Öborn, I. (1994). *Morphology, chemistry, mineralogy, and fertility of some acid sulfate soils in Sweden*. PhD Dissertation. Department of Soil Sciences. Reports and Dissertations 18, Swedish University of Agricultural Sciences.

BILAGOR

BILAGA A – TOTALHALTER I JORD

Tabell A.1 presenterar totala grundämneskoncentrationer för As, Ba, Cd, Co, Cr, Cu, Hg och Ni för samtliga skikt i jordprofilerna SSJ01A, SSJ01B, SSJ03A, SSJ03B, REF01A och REF01B. Proverna skickades till ALS Scandinavia.

Provnamn	As [mg/kg TS1	Ba [mg/kg TS1	Cd [mg/kg TS1	Co [mg/kg TS1	Cr [mg/kg TS1	Cu [mg/kg TS1	Hg [mg/kg TS1	Ni [mg/kg TS1
SS 101 A 0 0 0 2 m	633	125	0.336	17.8	58.5	31.8	<0.2	13
SSJ01A 0,0-0,2 m SSJ01A 0,2-0.4 m	8 53	125	0,330	17,0	20,5 80 Q	31,0	<0.2	44,0 13.1
SSJ01A 0,2-0,4 m	0,55	142	0,209	17	70.2	31.2	<0.2	чэ,ч 40.6
SSJ01A 0,4-0,0 m	0.33	140	<0.1	14.7	70,2 77 7	31,2	<0.2	34.2
SSI01A 0,0-0,0 m	9,55 11 7	178	<0.1	12.6	73.1	34.6	<0.2	29.6
SSI01A 1.0-1.2 m	5 57	123	<0.1	11.4	69 2	38.4	<0.2	30.3
SSI01A 1 2-1 4 m	5,57	120	<0.1 0 108	11, 4 12 7	64 1	43 1	<0.2	33.4
SSI01A 1 4-1 6 m	6.17	106	0,100	12,7	60 6	38.9	<0.2	48 9
SSJ01A 1.6-1.8 m	5.7	106	0,271	16.6	57 1	31.6	<0.2	43.2
SSJ01A 1.8-2.0 m	5,7 6.08	100	0,123	10,0	60 7	34.4	<0.2	42.3
SSJ01A 2.0-2.2 m	5 56	109	0,125	15.2	58.6	32.4	<0.2	40
SSJ01A 2.2-2.4 m	6.06	113	0.116	16.5	60	35.1	<0.2	42.4
SSJ01R 0.0-0.2 m	7	113	0.318	13.9	56.6	31.9	<0.2	39.7
SSJ01B 0,2-0,4 m	9.36	126	0.253	15,5	65.6	33.6	< 0.2	41.2
SSJ01B 0.4-0.6 m	8,36	143	0.192	15.5	75.3	35	< 0.2	39
SSJ01B 0,6-0,8 m	6,62	125	< 0.1	12,5	73,1	32,9	< 0.2	32,3
SSJ01B 0,8-1,0 m	6,57	134	< 0.1	12,2	75,1	34,8	< 0.2	31
SSJ01B 1,0-1,2 m	6,57	123	< 0.1	12,2	74	42,5	< 0.2	30,1
SSJ01B 1,2-1,4 m	5,58	113	< 0.1	11,8	62,7	37,7	< 0.2	31,6
SSJ01B 1,4-1,6 m	5,83	110	0,149	16,8	58	33,2	< 0.2	41,9
SSJ01B 1,6-1,8 m	5,38	107	0,148	15,5	58,6	32,3	< 0.2	43,1
SSJ01B 1,8-2,0 m	6,04	99,6	0,116	15,9	56,2	30,3	< 0.2	41,3
SSJ01B 2,0-2,2 m	6,6	128	0,152	18,8	65,8	37	< 0.2	49,7
SSJ01B 2,2-2,4 m	6,1	116	0,144	17,5	61,1	35,2	<0.2	45,6
SSJ03A 0,0-0,2 m	5,8	134	0,182	30,3	54,4	30,1	< 0.2	45,7
SSJ03A 0,2-0,4 m	6,64	145	0,126	19,4	67,4	33	< 0.2	39,4
SSJ03A 0,4-0,6 m	6,68	138	< 0.1	13,7	69,8	32,4	< 0.2	31,1
SSJ03A 0,6-0,8 m	6,74	113	< 0.1	13	68,7	26,6	< 0.2	29,1
SSJ03A 0,8-1,0 m	6,49	109	< 0.1	13,2	62,5	29,3	< 0.2	30,9
SSJ03A 1,0-1,2 m	5,99	115	0,344	24	68,6	37,8	< 0.2	57,6
SSJ03A 1,2-1,4m	5,46	95,3	0,158	18,7	59,2	29,9	< 0.2	43,3
SSJ03A 1,4-1,6 m	5,6	107	0,154	18,6	63,8	33,3	<0.2	45
SSJ03A 1,6-1,8 m	5,46	102	0,137	17,8	62,7	32,8	<0.2	43,9

Tabell A.1. Rådata för totalhalter för As, Ba, Cd, Co, Cr, Cu, Hg och Ni.

SSJ03A 1,8-2,0 m	5,92	116	0,134	18,4	64,4	33,2	< 0.2	42,9
SSJ03B 0,0-0,2 m	5,63	138	0,254	26,8	61,2	35,3	< 0.2	50,1
SSJ03B 0,2-0,4 m	6,22	142	0,132	16,1	67,9	31,9	< 0.2	37,9
SSJ03B 0,4-0,6 m	6,83	118	< 0.1	12,4	67,9	32,1	< 0.2	29,1
SSJ03B 0,6-0,8 m	8,28	130	< 0.1	11,6	67,7	30,1	< 0.2	28,9
SSJ03B 0,8-1,0 m	7,36	124	< 0.1	13,3	64,8	30,9	< 0.2	30,2
SSJ03B 1,0-1,2 m	6,41	110	0,286	22	65	32,5	< 0.2	53,5
SSJ03B 1,2-1,4 m	6,09	99,8	0,234	21,2	59,2	28,9	< 0.2	47,8
SSJ03B 1,4-1,6 m	5,53	101	0,194	17,3	57,7	31,5	< 0.2	42,2
SSJ03B 1,6-1,8 m	5,67	102	0,179	17,9	61,7	31,6	< 0.2	42,8
SSJ03B 1,8-2,0 m	5,66	102	0,157	16,5	59	30,9	< 0.2	42,7
REF01A 0,0-0,2 m	5,48	117	0,179	11,9	48,7	28,8	< 0.2	29,4
REF01A 0,2-0,4 m	6,19	124	0,178	14,6	61,6	31,2	< 0.2	31,6
REF01A 0,4-0,6 m	6,15	121	< 0.1	13,6	66,4	31,3	< 0.2	35,7
REF01A 0,6-0,8 m	5,4	127	0,118	13,7	66	29,2	< 0.2	36,4
REF01A 0,8-1,0 m	6,65	118	0,177	14,2	62	29,5	< 0.2	38,1
REF01A 1,0-1,2 m	4,64	109	0,159	11,4	54,2	28,4	<0.2	30
REF01A 1,2-1,4 m	7,14	119	0,14	12,2	48,4	28,8	<0.2	29,4
REF01A 1,4-1,6 m	9,2	159	0,214	19,1	58	38,3	<0.2	45,3
REF01A 1,6-1,8 m	9,68	162	0,199	18,1	60,5	40,4	<0.2	44
REF01A 1,8-2,0 m	8,32	174	0,221	18	64	39,9	<0.2	43,2
REF01B 0,0-0,2 m	5,74	147	0,498	18,7	66,9	41,2	<0.2	40,9
REF01B 0,2-0,4 m	5,74	132	0,22	15,5	67,9	37,6	<0.2	38,8
REF01B 0,4-0,6 m	6,7	126	0,126	17,6	65,1	29,8	<0.2	42,2
REF01B 0,6-0,8 m	6,81	134	0,161	14,8	64,4	32,4	< 0.2	40,7
REF01B 0,8-1,0 m	7,07	113	0,157	13,5	55,7	28,6	<0.2	30,9
REF01B 1,0-1,2 m	7,6	126	0,149	13,8	58,3	33,8	< 0.2	34,4
REF01B 1,2-1,4 m	6,65	158	0,19	17,6	66,2	39,4	<0.2	44,4
REF01B 1,4-1,6 m	9,02	162	0,188	19,1	62,3	38,3	<0.2	43,7
REF01B 1,6-1,8 m	5,84	165	0,186	18,3	60,9	36,4	<0.2	42,2
REF01B 1,8-2,0 m	6,12	186	0,228	18,8	62,4	39,3	<0.2	44,4

Tabell A.2 presenterar totala grundämneskoncentrationer för Pb, V, Zn, Fe och S i samtliga skikt i jordprofilerna SSJ01A, SSJ01B, SSJ03A, SSJ03B, REF01A och REF01B. Glödförlust (GF), torrsubstans (TOC) samt TOC beräknad visas också

Provnamn	Pb	V	Zn	Fe	S	GF vid	TS vid	ТОС
						550°C	105°C	beräknad
	[mg/kg TS]	[mg/kg TS]	[mg/kg TS]	[mg/kg TS]	[mg/kg TS]	[% TS]	[%]	[% TS]
SSJ01A 0,0-0,2 m	27,1	73,6	124	39500	491	7,83	76,4	4,54
SSJ01A 0,2-0,4 m	29	76,2	115	61400	519	6,48	73,4	3,76
SSJ01A 0,4-0,6 m	33,4	83,7	115	61100	542	5,37	70,1	3,12
SSJ01A 0,6-0,8 m	31,1	90,9	113	49200	619	5,13	65	2,98
SSJ01A 0,8-1,0 m	28,6	84	97,1	45600	707	5,16	61,2	2,99
SSJ01A 1,0-1,2 m	27,3	72,2	97,8	31700	746	5,08	52,2	2,95
SSJ01A 1,2-1,4 m	25,6	66,7	96,3	35800	3770	7,48	47,1	4,34
SSJ01A 1,4-1,6 m	23,4	64,1	115	41600	12800	8,24	48,9	4,78
SSJ01A 1,6-1,8 m	23,1	61,4	116	46300	23100	8,18	47,4	4,74
SSJ01A 1,8-2,0 m	23,5	63,7	118	41800	15200	7,33	46,7	4,25
SSJ01A 2,0-2,2 m	22,6	62,6	114	38800	12700	7,44	45,9	4,32
SSJ01A 2,2-2,4 m	23,3	63,7	115	40000	12500	7,66	44,8	4,44
SSJ01B 0,0-0,2 m	26,7	67,7	118	38800	625	9,17	71,1	5,32
SSJ01B 0,2-0,4 m	30,9	77,5	121	56400	686	7,35	70,8	4,26
SSJ01B 0,4-0,6 m	31,1	87,7	126	55900	625	6	69,5	3,48
SSJ01B 0,6-0,8 m	26,8	76	112	45000	767	5,22	62,7	3,03
SSJ01B 0,8-1,0 m	26,6	79,9	105	46200	994	5,25	53	3,05
SSJ01B 1,0-1,2 m	28,2	78,3	108	36800	804	5,16	51,2	2,99
SSJ01B 1,2-1,4 m	25,5	64,8	87,2	34900	2420	7,14	47,2	4,14
SSJ01B 1,4-1,6 m	23,3	62,2	106	38300	10600	7,69	48,2	4,46
SSJ01B 1,6-1,8 m	22,7	60,2	114	43200	17600	7,48	47,2	4,34
SSJ01B 1,8-2,0 m	20,8	61,7	106	45900	18600	7,18	46,4	4,17
SSJ01B 2,0-2,2 m	26,2	70,2	120	42900	14600	7,49	45	4,34
SSJ01B 2,2-2,4 m	23,9	64	113	42200	15300	7,85	44,9	4,55
SSJ03A 0,0-0,2 m	26	77	129	45300	990	7,93	68,4	4,6
SSJ03A 0,2-0,4 m	29,1	78,6	133	47100	2740	6,73	65,2	3,9
SSJ03A 0,4-0,6 m	30,4	83,1	116	57700	3280	5,76	59	3,34
SSJ03A 0,6-0,8 m	20	73,5	109	46700	1960	5,85	55,6	3,39
SSJ03A 0,8-1,0 m	23,1	70,5	103	42600	2570	6,16	51,6	3,57
SSJ03A 1,0-1,2 m	28,1	73,3	154	46000	11400	6,78	48,2	3,93
SSJ03A 1,2-1,4m	21,6	67,5	110	46800	14700	7,08	47,6	4,11
SSJ03A 1,4-1,6 m	25,1	68	124	44200	14300	6,95	45,3	4,03
SSJ03A 1,6-1,8 m	24,6	64,9	125	48000	19500	6,97	45,2	4,04
SSJ03A 1,8-2,0 m	25,6	69	125	45400	12600	7,32	45,1	4,24
SSJ03B 0,0-0,2 m	29,2	78,3	152	40900	923	8,91	68,6	5,16

Tabell A.2. Rådata för totalhalter för Pb, V, Zn, Fe och S, samt GF, TS och TOC.

SSJ03B 0,2-0,4 m	26,4	76,4	130	46900	1590	7,09	64,1	4,11
SSJ03B 0,4-0,6 m	30,8	75,4	114	50200	1680	6,05	60,2	3,51
SSJ03B 0,6-0,8 m	32,1	75,4	110	48800	1670	5,97	55,9	3,46
SSJ03B 0,8-1,0 m	20,7	74,2	115	44400	1660	6,41	49	3,72
SSJ03B 1,0-1,2 m	25,2	70,2	148	45600	10900	6,35	48,4	3,68
SSJ03B 1,2-1,4 m	23,5	64,6	119	39900	12200	7,26	50,4	4,21
SSJ03B 1,4-1,6 m	23	64,7	114	38900	12900	6,84	45,6	3,97
SSJ03B 1,6-1,8 m	23,9	65,3	117	42200	14300	6,98	45,3	4,05
SSJ03B 1,8-2,0 m	23,5	65	115	40100	12400	9,6	44	5,57
REF01A 0,0-0,2 m	26,1	65,2	93,6	37000	436	9,3	70,7	5,39
REF01A 0,2-0,4 m	27,1	72,9	97,4	43200	341	7,86	72,3	4,56
REF01A 0,4-0,6 m	27,3	72,4	100	43100	151	4,39	75,2	2,55
REF01A 0,6-0,8 m	25,8	70	102	39300	159	4,27	73,5	2,48
REF01A 0,8-1,0 m	24,5	68,6	105	43500	180	4,18	71,7	2,43
REF01A 1,0-1,2 m	22	52,7	89,2	30700	128	3,62	72,7	2,1
REF01A 1,2-1,4 m	21	54,3	84,8	33100	98,5	3,25	72,8	1,88
REF01A 1,4-1,6 m	22,4	66,7	108	44200	342	3,49	65,6	2,02
REF01A 1,6-1,8 m	24,2	68,5	115	47100	705	3,6	65,1	2,09
REF01A 1,8-2,0 m	25	71,7	121	46600	93,7	3,74	63,7	2,17
REF01B 0,0-0,2 m	29,8	75,2	119	43100	446	9,05	70,1	5,25
REF01B 0,2-0,4 m	27,8	71,9	113	43100	276	6,31	71	3,66
REF01B 0,4-0,6 m	23,7	73,3	100	51300	150	5,16	69,8	2,99
REF01B 0,6-0,8 m	25,8	70,4	113	46300	128	5,02	65,5	2,91
REF01B 0,8-1,0 m	22,4	59,5	93	37800	115	4,08	68,6	2,36
REF01B 1,0-1,2 m	22,5	62,5	102	41400	88	3,75	65,7	2,18
REF01B 1,2-1,4 m	24	75,9	114	40300	104	4,12	67,9	2,39
REF01B 1,4-1,6 m	23,5	73,4	107	39500	93,4	3,99	64,6	2,31
REF01B 1,6-1,8 m	21,8	70	104	37000	92,2	3,53	64,4	2,05
REF01B 1,8-2,0 m	23,7	73,3	111	37200	114	3,69	63,4	2,14

BILAGA B-KLASSIFICERING AV JORDPROFILER

Nedan i tabell B.1–B.6 presenteras den fullständiga klassificeringen av de sex jordprofilerna utifrån det svensk-finska systemet (Boman et al. 2023).

Provnamn	Djup (m)	pHfält	рНікк	ΔрН	S (%)	Material	Klass	Kommentar
SSJ01A	0-0,2	5,1	4,6	0,5	0,0491	Hyposulfid	Ej SSJ	
SSJ01A_dbl		5,3	4,7	0,6				$\geq 0.01\%$ S
SSJ01A	0,2-0,4	5,5	5	0,5	0,0519	Hyposulfid	Ej SSJ	$\text{pm} \times 24,0$
SSJ01A_dbl		5,5	5,1	0,4				
SSJ01A	0,4-0,6	5,3	4,9	0,4	0,0542	Hyposulfid	Ej SSJ	
SSJ01A_dbl		5,4	5	0,4				
SSJ01A	0,6-0,8	5	4,6	0,4	0,0619	Hyposulfid	Ej SSJ	
SSJ01A_dbl		5	4,6	0,4				
SSJ01A	0,8-1,0	4,7	4,2	0,5	0,0707	Parasulfat /	Para-	Dbl bedöms
SSJ01A_dbl		4,6	4,2	0,4		Parahypersulfid	SSJ	som parasulfat då $\Delta pH < 0.5$
SSJ01A	1,0-1,2	4,7	4,3	0,4	0,0746	Parasulfat	Para-	$\Delta pH \ge 0,5$ och
SSJ01A_dbl		4,6	4,3	0,3			SSJ	рН _{ІNK} 4–4,5
SSJ01A	1,2-1,4	5,3	3,7	1,6	0,377	Hypersulfid	SSJ	∆pH ≥0,5 och
SSJ01A_dbl		5,1	3,9	1,2				$pH_{INK} < 4$
SSJ01A	1,4-1,6	6,4	2,7	3,7	1,28	Hypersulfid	SSJ	
SSJ01A_dbl		6,4	2,8	3,6				
SSJ01A	1,6-1,8	7,8	2,7	5,1	2,31	Hypersulfid	SSJ	
SSJ01A_dbl		7,7	2,9	4,8				
SSJ01A	1,8-2,0	8,1	3	5,1	1,52	Hypersulfid	SSJ	
SSJ01A_dbl		7,9	3,6	4,3				
SSJ01A	2,0-2,2	7,7	3,5	4,2	1,27	Hypersulfid	SSJ	
SSJ01A_dbl		7,8	3,7	4,1				
SSJ01A	2,2-2,4	8,2	3,2	5	1,25	Hypersulfid	SSJ	
SSJ01A_dbl		8,1	3,5	4,6				
Huvudklass: S	SJ, sulfatj	ord (aktiv	SSJ)					

Tabell B.1. Bedömning för samtliga skikt för SSJ01A.

Provnamn	Djup	pHfält	рНікк	ΔрН	S (%)	Material	Klass	Kommentar
SSJ01B	(m) 0-0.2	4.8	4.2	0.6	0.0625	Parahypersulfid	Para-SSJ	$\Delta pH > 0.5$ och
SSJ01B dbl	,_	.,	4 3	0.7	0,0020	i anany poro anna	1 414 5.50	рНик 4–4,5,
SSUID_UDI	0204	4.0	1,5	0,7	0.0686	Darahypersulfid	Doro SSI	
SSJUID SSJUID JEI	0,2-0,4	4,9	4,4	0,5	0,0080	1 aranypersunia	1 414-555	
SSJUIB_dbl	0.1.0.6	4,9	4,5	0,4	0.0605	101	E' agi	
SSJ01B	0,4-0,6	4,9	4,6	0,3	0,0625	Hyposulfid	Ej SSJ	≥0,01% S
SSJ01B_dbl		5	4,6	0,4				$p\pi ink \ge 4,0$
SSJ01B	0,6-0,8	4,6	4,4	0,2	0,0767	Parasulfat	Para-SSJ	$\Delta pH < 0.5$
SSJ01B_dbl		4,7	4,4	0,3				ocn $pH_{INK} 4-4.5$
SSJ01B	0,8-1,0	4,5	4,1	0,4	0,0994	Parasulfat	Para-SSJ	eller pH _{FÄLT}
SSJ01B_dbl		4,3	4,1	0,2				4-4,5
SSJ01B	1,0-1,2	4,4	4,1	0,3	0,0804	Parasulfat	Para-SSJ	
SSJ01B_dbl		4,3	4	0,3				
SSJ01B	1,2-1,4	4,6	3,9	0,7	0,242	Parasulfat/	Para-SSJ	Dbl uppfyller
SSJ01B_dbl		4,5	4,1	0,4		Parahypersulfid		parasulfat
SSJ01B	1,4-1,6	6,6	2,9	3,7	1,06	Hypersulfid	SSJ	∆pH ≥0,5
SSJ01B_dbl		6,3	3	3,3				och $pH_{INK} < 4$
SSJ01B	1,6-1,8	7,5	2,9	4,6	1,76	Hypersulfid	SSJ	Prink .
SSJ01B_dbl		7,2	3	4,2				
SSJ01B	1,8-2,0	7,4	3,3	4,1	1,86	Hypersulfid	SSJ	
SSJ01B_dbl		7,5	3,6	3,9				
SSJ01B	2,0-2,2	7,6	3,6	4	1,46	Hypersulfid	SSJ	
SSJ01B_dbl		7,3	3,6	3,7				
SSJ01B	2,2-2,4	7,9	3,6	4,3	1,53	Hypersulfid	SSJ	
SSJ01B_dbl		7,7	3,6	4,1				
Huvudklass:	SSJ, sulfa	tjord (aktiv	SSJ)			1		1

Tabell B.2. Bedömning för samtliga skikt för SSJ01B.

Provnamn	Djup (m)	pHfält	рНікк	ΔрН	S (%)	Material	Klass	Kommentar
SSJ03A	0-0,2	5,9	4,6	1,3	0,099	Parahypersulfid	Para-SSJ	∆pH ≥0,5 och
SSJ03A_dbl		6,1	4,5	1,6				рН _{INK} 4–4,5,
SSJ03A	0,2-0,4	4,5	4,2	0,3	0,247	Parasulfat/	Para-SSJ	Dbl
SSJ03A_dbl		5	4,4	0,6		parahypersulfid		parahypersulfid
SSJ03A	0,4-0,6	4,9	4,1	0,8	0,328	Parahypersulfid	Para-SSJ	∆pH ≥0,5 och
SSJ03A_dbl		4,6	4,1	0,5				рН _{INK} 4–4,5,
SSJ03A	0,6-0,8	4,5	4	0,5	0,196	Parasulfat &	Para-SSJ	Kan klassas
SSJ03A_dbl		4,5	4	0,5		parahypersulfid		som båda
SSJ03A	0,8-1,0	4,8	3,6	1,2	0,257	Hypersulfid	SSJ	∆pH ≥0,5
SSJ03A_dbl		4,4	3,9	0,5				och nHink < 4
SSJ03A	1,0-1,2	5,9	2,8	3,1	1,14	Hypersulfid	SSJ	prink
SSJ03A_dbl		5,9	2,7	3,2				
SSJ03A	1,2-1,4	7,2	2,9	4,3	1,47	Hypersulfid	SSJ	
SSJ03A_dbl		7,4	2,9	4,5				
SSJ03A	1,4-1,6	7,8	3	4,8	1,43	Hypersulfid	SSJ	
SSJ03A_dbl		7,8	3	4,8				
SSJ03A	1,6-1,8	7,7	3	4,7	1,95	Hypersulfid	SSJ	
SSJ03A_dbl		8	3	5				
SSJ03A	1,8-2,0	7,8	3	4,8	1,26	Hypersulfid	SSJ	
SSJ03A_dbl		7,9	3	4,9				
Huvudklass: S	SSJ, sulfatjo	rd (aktiv	SSJ)				1	

Tabell B.3. Bedömning för samtliga skikt för SSJ03A.

Provnamn	Djup	pHfält	рНікк	ΔрН	S (%)	Material	Klass	Kommentar
SS 102D	(m)	5.4	16	0.8	0.0022	Urmogulfid	E: CCI	>0.010/ 0
22102B	0-0,2	5,4	4,0	0,8	0,0925	Hyposullid	EJ 221	$\geq 0,01\%$ S
SSJ03B_dbl		5,8	4,6	1,2				$pH_{INK} \ge 4,0$
SSJ03B	0,2-0,4	4,8	4,5	0,3	0,159	Parasulfat /	Para-	Dbl
SSJ03B_dbl		5,1	4,4	0,7		Paranypersuind	221	paranypersuinid
SSJ03B	0,4-0,6	4,7	4,3	0,4	0,168	Parasulfatjord	Para-	$\Delta pH < 0.5$ och
SSJ03B_dbl		4,7	4,4	0,3			221	pHfält 4–4,5
SSJ03B	0,6-0,8	4,6	4,2	0,4	0,167	Parasulfat /	Para-	Dbl
SSJ03B_dbl		4,6	4,1	0,5		Parahypersulfid	88J	parahypersulfiid
SSJ03B	0,8-1,0	4,4	3,9	0,5	0,166	Hypersulfid	SSJ	∆pH ≥0,5
SSJ03B_dbl		4,4	3,8	0,6				och nH _{DW} < 4
SSJ03B	1,0-1,2	4,7	3,1	1,6	1,09	Hypersulfid	SSJ	PIIMK
SSJ03B_dbl		4,7	3,1	1,6				
SSJ03B	1,2-1,4	6,6	2,7	3,9	1,22	Hypersulfid	SSJ	
SSJ03B_dbl		6,6	2,8	3,8				
SSJ03B	1,4-1,6	7,5	2,8	4,7	1,29	Hypersulfid	SSJ	
SSJ03B_dbl		7,7	2,9	4,8				
SSJ03B	1,6-1,8	7,7	2,8	4,9	1,43	Hypersulfid	SSJ	
SSJ03B_dbl		7,9	3,1	4,8				
SSJ03B	1,8-2,0	7,7	3	4,7	1,24	Hypersulfid	SSJ	
SSJ03B_dbl	1	7,9	3	4,9				
Huvudklass:	SSJ, sulfa	atjord (ak	tiv SSJ)	•	•	•		

Tabell B.4. Bedömning för samtliga skikt för SSJ03B.

Provnamn	Djup (m)	pH _{FÄLT}	рНікк	ΔрН	S (%)	Material	Klass	Kommentar	
REF01A	0-0,2	5,5	5,2	0,3	0,0436	Hyposulfid	Ej SSJ	≥0,01% S	
REF01A_dbl		5,9	5,6	0,3				pH _{INK} ≥ 4,6	
REF01A	0,2-0,4	6	5,4	0,6	0,0341	Hyposulfid	Ej		
REF01A_dbl		6,3	5,7	0,6			SSJ		
REF01A	0,4-0,6	6	5,8	0,2	0,0151	Hyposulfid	Ej		
REF01A_dbl		6,5	6	0,5			SSJ		
REF01A	0,6-0,8	6,6	6,2	0,4	0,0159	Hyposulfid	Ej SSJ		
REF01A_dbl		6,9	6,4	0,5					
REF01A	0,8-1,0	6,7	6,3	0,4	0,018	Hyposulfid	Ej		
REF01A_dbl		6,9	6,4	0,5			SSJ		
REF01A	1,0-1,2	6,9	6,5	0,4	0,0128	Hyposulfid	Ej		
REF01A_dbl		7	6,5	0,5			SSJ		
REF01A	1,2-1,4	7,2	6,8	0,4	0,00985	Ej	Ej	< 0,01% S	
REF01A_dbl		7,3	6,9	0,4		sulfidmaterial	SSJ		
REF01A	1,4-1,6	7,4	7	0,4	0,0342	Hyposulfid	Ej	≥0,01% S	
REF01A_dbl		7,5	7,1	0,4			SSJ	$pH_{INK} \ge 4,6$	
REF01A	1,6-1,8	7,6	7,4	0,2	0,0705	Hyposulfid	Ej		
REF01A_dbl		7,6	7,4	0,2			SSJ		
REF01A	1,8-2,0	7,7	7,7	0	0,00937	Ej	Ej	< 0,01% S	
REF01A_dbl		7,7	7,7	0		sulfidmaterial	SSJ		
Huvudklass: Ej SSJ									

Tabell B.5. Bedömning för samtliga skikt för REF01A.

Provnamn	Djup (m)	pHfält	рНікк	ΔрН	S (%)	Material	Klass	Kommentar	
REF01B	0-0,2	6,2	5,6	0,6	0,0446	0,0446 Hyposulfid		≥0,01% S	
REF01B_dbl		6,7	6,1	0,6				$pH_{INK} \ge 4,6$	
REF01B	0,2-0,4	6,5	5,9	0,6	0,0276 Hyposulfid		Ej SSJ		
REF01B_dbl		6,5	5,9	0,6					
REF01B	0,4-0,6	6,8	6,1	0,7	0,015	Hyposulfid	Ej SSJ		
REF01B_dbl		6,8	6,3	0,5					
REF01B	0,6-0,8	7	6,5	0,5	0,0128	Hyposulfid	Ej SSJ		
REF01B_dbl		7,1	6,6	0,5					
REF01B	0,8-1,0	7,4	6,5	0,9	0,0115	Hyposulfid	Ej SSJ		
REF01B_dbl		7,1	6,6	0,5					
REF01B	1,0-1,2	7,3	6,7	0,6	0,0088	Ej	Ej SSJ	< 0,01% S	
REF01B_dbl		7,3	6,8	0,5		sulfidmaterial			
REF01B	1,2-1,4	7,5	6,9	0,6	0,0104	Hyposulfid	Ej SSJ	≥0,01% S	
REF01B_dbl		7,6	7	0,6				pHink ≥ 4,6	
REF01B	1,4-1,6	7,5	7,5	0	0,00934	Ej	Ej SSJ	< 0,01% S	
REF01B_dbl		7,6	7,7	-0,1		sulfidmaterial			
REF01B	1,6-1,8	7,7	7,8	-0,1	0,00922	Ej	Ej SSJ		
REF01B_dbl		7,8	7,8	0		sulfidmaterial			
REF01B	1,8-2,0	7,7	7,8	-0,1	0,0114	Hyposulfid	Ej SSJ	≥0,01% S	
REF01B_dbl	1	7,7	7,8	-0,1				$pH_{INK} \ge 4,6$	
Huvudklass: Ej SSJ									

Tabell B.6. Bedömning för samtliga skikt för REF01B.

BILAGA C – DATA FÖR METALLMOBILITET

Nedan presenteras data från laktester och undersökning av metallmobilitet enligt avsnitt 3.5.

Bilaga C.1 – Analyssvar från extraktion med 0,43 M HNO3

Tabell C.1 visar den geokemiskt aktiva fraktionen för ämnena Al, As, Ba, Ca, Cd, Co, Cr, Cu, Fe, K, Mg, Mn, Mo, Na, Ni, P, Pb, Si, Sr, V, och Zn analyserat för specialproverna på ALS Scandinavia i duplikat (dbl). Värdena för SSJ01B 2,0–2,2 m användes inte, då de först rapporterats felaktigt.

Tabell C.1. Halterna arsenik Al, As, Ba, Ca, Cd, Co, Cr, Cu, Fe, K, Mg, Mn, Mo, Na, Ni, P, Pb, Si, Sr, V, och Zn.										
		SSJ01B 2,0-2,2		SSJ03A 1,6–1,8		SSJ03B 1,8-2,0		REF01B 1,6-1,8		
Ämne	Enhet		dbl		dbl		dbl		dbl	
Al	mg/kg TS	2821	2865	2795	2815	2606	1919	2879	2833	
As	mg/kg TS	0,4877	0,4636	0,3835	0,3427	0,3403	0,2606	0,1879	0,2045	
Ba	mg/kg TS	21,10	22,09	15,73	14,50	13,98	10,12	73,78	74,84	
Ca	mg/kg TS	4418	4155	3346	3305	2973	2152	29543	26513	
Cd	mg/kg TS	0,0671	0,0691	0,0630	0,0628	0,0625	0,0526	0,1453	0,1773	
Со	mg/kg TS	1,341	1,338	1,871	1,589	1,484	1,043	5,015	5,545	
Cr	mg/kg TS	2,712	2,799	3,019	3,019	2,757	2,145	3,151	3,075	
Cu	mg/kg TS	0,6386	0,5161	0,2203	0,1838	0,2951	0,2262	14,63	15,45	
Fe	mg/kg TS	3324	3543	3733	3468	3188	2326	3000	3272	
K	mg/kg TS	717,3	732,6	871,1	846,6	814,2	618,2	518,1	478,7	
Mg	mg/kg TS	2231	2231	2468	2407	2197	1650	1591	1477	
Mn	mg/kg TS	282,1	284,3	432,5	403,9	340,3	245,6	277,2	363,6	
Мо	mg/kg TS	0,02187	0,02187	0,02040	0,02040	0,02154	0,02154	0,0303	0,0303	
Na	mg/kg TS	916,4	907,6	1022,0	993,5	1051,2	758,2	186,3	172,7	
Ni	mg/kg TS	5,030	4,943	5,549	5,120	4,890	3,489	6,075	6,969	
Р	mg/kg TS	636,4	649,5	636,5	646,7	549,3	413,6	354,5	289,4	
Pb	mg/kg TS	12,51	12,66	11,34	11,28	9,930	7,884	11,62	11,7261	
Si	mg/kg TS	1756	1828	1877	1858	1708	1351	1863	1818	
Sr	mg/kg TS	32,81	32,59	29,78	29,38	28,00	20,31	33,63	30,60	
V	mg/kg TS	8,989	9,360	8,935	8,670	7,927	6,074	6,908	7,863	
Zn	mg/kg TS	26,68	26,03	26,72	26,52	23,69	18,85	24,24	23,33	
Bilaga C.2 – Analyssvar från pH-beroende laktest

Tabell C.2–C.5 visar koncentrationer från det pH-beroende laktestet för ämnena Al, As, Ba, Ca, Cd, Co, Cr, Cu, Fe, K, Mg, Mn, Mo, Na, Ni, P, Pb, Si, Sr, V, och Zn analyserat för opåverkade (reducerade) specialprover på ALS Scandinavia i duplikat (dbl). Prover som slutar på 1–2 är duplikat för pH-steg 1, 3–4 är duplikat för pH-steg 2, 5–6 är duplikat för pH-steg 3 och 7–8 är duplikat för pH-steg 4.

Tabell C.2. Koncentrationer Al, As, Ba, Ca, Cd, Co, Cr, Cu, Fe, K, Mg, Mn, Mo, Na, Ni, P, Pb, Si, Sr, V, Zn och pH i SSJ01B.

Ämne	Enhet	SSJ01B1	SSJ01B2	SSJ01B3	SSJ01B4	SSJ01B5	SSJ01B6	SSJ01B7	SSJ01B8
Al	μg/L	3220	2280	94,2	21,3	37,2	14,6	86,5	117
As	μg/L	14,3	17,3	9,28	8,96	2,09	1,71	24	27,4
Ba	μg/L	154	131	34,1	23,3	8,31	9,37	3,67	3,92
Ca	mg/L	96,3	99,7	56,2	54,7	23,7	29,2	4,84	4,45
Cd	μg/L	1,51	1,33	0,204	0,119	< 0.01	< 0.01	< 0.01	< 0.02
Со	μg/L	68,2	66,7	20,2	8,99	1,12	1,15	5,06	4,8
Cr	μg/L	1,5	1,36	0,515	0,45	0,549	0,51	4,12	3,99
Cu	μg/L	2,48	4,68	4,19	3,03	4,48	4,79	37,9	33,7
Fe	mg/L	6,55	2,72	0,0784	0,0225	0,0144	0,0109	0,105	0,125
K	mg/L	10,8	9,6	6,79	6,75	5,59	5,49	3,59	3,9
Mg	mg/L	33,5	34	22	21,7	12,2	13,2	1,71	1,59
Mn	μg/L	4810	4840	2610	1950	268	348	18,9	7,3
Мо	μg/L	0,255	0,144	1,98	7,04	11,4	11,8	15,3	17,3
Na	mg/L	19,2	19,2	16,4	17,3	16,5	17,1	83,4	89,4
Ni	μg/L	162	148	28,9	10,2	3,3	3,44	10,4	10,4
Р	μg/L	1300	1380	413	382	106	97,9	960	929
Pb	μg/L	5,92	4,53	0,43	0,206	0,119	0,0873	0,615	0,83
Si	mg/L	14,4	14	6	6,15	5,14	5,32	6,56	7,01
Sr	μg/L	552	556	298	284	137	158	27,5	27,8
\mathbf{V}	μg/L	14	7,86	8,64	15,9	5,82	5,15	48	55,2
Zn	μg/L	271	227	38,3	21,4	4,54	10,9	8,05	12,3
pН		3,6	3,7	5	5,6	6,8	6,9	8,8	8,8

Ämne	Enhet	SSJ03A1	SSJ03A2	SSJ03A3	SSJ03A4	SSJ03A5	SSJ03A6	SSJ03A7	SSJ03A8
Al	μg/L	3440	3060	360	192	50,1	42,7	69,3	89,5
As	μg/L	16,5	17	5,3	9,48	1,32	1,12	2,92	8,28
Ba	μg/L	112	102	34,7	28,5	12,3	11,2	9,65	6,12
Ca	mg/L	84,9	80,8	53	49,8	28,6	27,4	11,3	7,04
Cd	μg/L	1,58	1,48	0,521	0,431	0,0192	< 0.02	< 0.03	< 0.02
Со	μg/L	79,4	82,2	45,6	38,5	2,65	2,31	2,97	3,34
Cr	μg/L	1,76	1,49	0,489	0,574	0,407	0,326	1,12	1,78
Cu	μg/L	7,09	6,11	2,29	2,63	3,19	3,7	13,6	17,5
Fe	mg/L	5,15	4,42	0,468	0,195	0,0234	0,0124	0,056	0,0544
К	mg/L	22,8	11,9	9,59	8,48	8,32	8,01	7,24	6,2
Mg	mg/L	38,6	36,9	28,2	24,9	19,8	18,3	7,28	3,68
Mn	μg/L	7280	7240	5090	4380	705	704	71,6	4,01
Мо	μg/L	0,226	0,266	0,943	1,35	14,4	16	31,2	27,2
Na	mg/L	22,9	22	21,8	19,3	23,4	21,4	91	92,5
Ni	μg/L	177	178	77,4	61,6	6,74	6,19	8,08	8,23
Р	μg/L	1660	1450	230	273	87,9	79	182	313
Pb	μg/L	13,1	6,45	1,11	0,892	0,151	0,126	0,341	0,328
Si	mg/L	16	14,9	6,85	6	5,69	5,24	6,9	6,03
Sr	μg/L	534	516	332	297	182	169	78,3	46,8
V	μg/L	14,6	12,4	4,46	5,75	1,86	1,75	9,5	16,6
Zn	μg/L	255	240	69,9	59,1	12,1	11,2	20,3	12,7
pН		3,7	3,7	4,7	4,8	6,4	6,5	8,4	8

Tabell C.3. Koncentrationer Al, As, Ba, Ca, Cd, Co, Cr, Cu, Fe, K, Mg, Mn, Mo, Na, Ni, P, Pb, Si, Sr, V, Zn och pH i SSJ03A.

Ämne	Enhet	SSJ03B1	SSJ03B2	SSJ03B3	SSJ03B4	SSJ03B5	SSJ03B6	SSJ03B7	SSJ03B8
Al	μg/L	2660	3750	397	126	36,4	29,7	117	194
As	μg/L	16	16,2	4,37	5,35	1,01	1,09	11,1	10,9
Ba	μg/L	98,9	116	34,3	27,5	10,5	12,2	7,47	5,71
Ca	mg/L	78,8	81,3	55,7	49,8	29,9	25	5,59	8,64
Cd	μg/L	1,48	1,69	0,585	0,33	< 0.02	< 0.02	< 0.02	< 0.03
Со	μg/L	78,2	85,1	44,4	32,9	1,42	1,69	3,69	5,86
Cr	μg/L	1,36	1,71	0,506	0,481	0,351	0,419	2,06	2,29
Cu	μg/L	7,09	4,23	3,12	2,64	4,34	3,27	21,6	22,8
Fe	mg/L	3,05	6,31	0,286	0,0936	0,0116	0,0129	0,0784	0,0904
K	mg/L	16,3	12,5	10,5	10,2	8,23	8,12	5,73	6,65
Mg	mg/L	34,9	35,8	27,6	26,8	16,5	16,2	2,34	4,63
Mn	μg/L	6140	6070	4190	3930	422	568	4,45	184
Мо	μg/L	0,197	0,261	0,966	1,92	15,8	17,3	24,3	31,7
Na	mg/L	23,1	23	23,1	22,6	21,3	21,2	96,8	93
Ni	μg/L	162	193	78,5	47,4	4,88	5,08	8,51	13,4
Р	μg/L	1690	1380	233	259	71,8	73,8	434	422
Pb	μg/L	5,48	7,82	1,1	0,582	0,112	0,102	0,519	0,604
Si	mg/L	14,9	15,7	6,97	6,8	4,87	4,92	6,25	6,59
Sr	μg/L	515	531	358	325	191	160	37,4	60,1
\mathbf{V}	μg/L	9,96	16,4	3,93	5,93	1,96	2,38	20,3	19,4
Zn	μg/L	231	265	68,6	52,3	14,2	17,3	15,9	8,68
рН		3,7	3,5	4,7	4,9	6,5	6,6	8,4	8,3

Tabell C.4. Koncentrationer Al, As, Ba, Ca, Cd, Co, Cr, Cu, Fe, K, Mg, Mn, Mo, Na, Ni, P, Pb, Si, Sr, V, Zn och pH i SSJ03B.

Koncentration Mn och Co saknas för REF01B2 på grund av ett analysfel.

Tabell C.5. Koncentrationer A	Al, As, Ba,	Ca, Cd,	Co, Cr	, Cu, Fe,	K, Mg,	Mn, Mo	, Na, Ni, I	P, Pb, Si	, Sr, V,	, Zn och
pH i REF01B.										

Ämne	Enhet	REF01B1	REF01B2	REF01B3	REF01B4	REF01B5	REF01B6	REF01B7	REF01B8
Al	μg/L	31	3,81	26	5,72	7,5	5,66	154	129
As	μg/L	< 0.2	< 0.05	0,0568	< 0.05	0,104	0,0981	8,55	7,61
Ba	μg/L	48,9	61,3	52	47,9	15,1	13,9	6,36	4,09
Ca	mg/L	124	162	131	124	37	35,1	2,81	1,62
Cd	μg/L	< 0.01	0,0182	0,0111	0,0121	0,00348	0,00267	< 0.008	< 0.006
Со	μg/L	0,03		0,0162	0,0082	0,0101	0,0171	0,0453	0,0457
Cr	μg/L	0,324	0,26	0,237	0,2	0,26	0,325	1,28	0,482
Cu	μg/L	2,32	0,566	0,646	0,679	0,911	1,04	13,2	12,3
Fe	mg/L	0,044	0,00148	0,0204	0,00518	0,00296	0,00147	0,0254	0,0325
K	mg/L	4,38	2,56	3,08	2,34	1,96	1,67	0,517	0,466
Mg	mg/L	8,94	7,76	8,16	7,65	3,84	3,63	0,125	< 0.09
Mn	μg/L	1,36		1,96	0,224	0,0987	0,0806	0,374	0,382
Мо	μg/L	0,484	0,492	0,578	0,49	2,23	2,29	6,84	6,77
Na	mg/L	5,04	3,38	4,05	3,89	4,5	4,26	62,6	62,3
Ni	μg/L	0,566	0,522	0,42	0,492	0,243	0,272	0,707	0,836
Р	μg/L	6,15	16,9	8,04	3,88	5,7	7,05	287	263
Pb	μg/L	0,131	0,0454	0,104	0,0502	0,0522	0,0416	0,0979	0,12
Si	mg/L	2,96	2,72	2,81	2,65	1,97	1,86	6,84	6,25
Sr	μg/L	176	194	175	164	56,9	53,6	4,25	2,48
\mathbf{V}	μg/L	0,142	0,0699	0,124	0,0661	0,0837	0,0746	17,7	14,8
Zn	μg/L	7,03	9,62	9,06	8,3	10,5	8,8	20,3	9,82
рН		7,4	7,4	7,5	7,5	8,2	8,2	10,6	10,5

Bilaga C.3 – Analyssvar från extraktion med 0,001 M CaCl₂ av oxiderade prover

Tabell C.6 visar koncentrationer för extraktion med 0,001 M CaCl₂ av oxiderade prover för ämnena Al, As, Ba, Ca, Cd, Co, Cr, Cu, Fe, K, Mg, Mn, Mo, Na, Ni, P, Pb, Si, Sr, V, och Zn analyserat på ALS Scandinavia i duplikat (dbl). Koncentration P saknas för SSJ01B 2,0–2,2 m på grund av ett analysfel.

		SSJ01B 2	2,0–2,2 m	SSJ03A	1,6–1,8 m	SSJ03B	1,8–2,0 m	REF01B	1,6–1,8 m
Ämne	Enhet		dbl		dbl		dbl		dbl
Al	μg/L	4250	185	4040	2490	2700	192	15,1	10,6
As	μg/L	<0.2	0,591	0,556	0,293	< 0.2	0,85	0,232	0,247
Ba	μg/L	103	32	115	103	92,2	25,2	11	10,2
Ca	mg/L	106	63,2	69,1	101	76	41,1	28,3	29,8
Cd	μg/L	2,61	0,275	2,4	2,66	2,24	0,457	< 0.004	< 0.004
Со	μg/L	90,6	16,5	101	117	101	28,7	0,0362	0,0513
Cr	μg/L	1,26	0,686	1,05	0,92	0,786	0,62	0,213	0,143
Cu	μg/L	28,9	4,58	27,6	3,8	14,1	3,2	1,89	2,01
Fe	mg/L	20,3	0,792	19,7	20	10,1	0,635	0,00282	0,00197
K	mg/L	12,7	8,73	15,6	17,7	15,3	8,76	1,5	1,4
Mg	mg/L	35,4	30,4	45	62,2	47,3	26,5	2,73	2,81
Mn	μg/L	6500	3110	11700	14300	10300	4450	2,68	3,72
Мо	μg/L	<0.2	1,14	< 0.2	< 0.2	< 0.2	0,828	3,34	3,96
Na	mg/L	21,7	26,1	29,3	42,1	33,5	25,2	3,65	3,7
Ni	μg/L	258	30,4	252	286	252	51,8	0,374	0,517
Р	μg/L		72,1	20,2	34,7	22,9	78,5	11,2	12,3
Pb	μg/L	6,87	0,365	7,32	3,45	3,97	0,487	0,0683	0,0435
Si	mg/L	10,7	7,34	9,27	13,8	9,61	6,08	2,2	2,5
Sr	μg/L	627	373	581	829	643	301	40,7	42,8
\mathbf{V}	μg/L	0,786	0,799	0,832	0,5	0,472	1,2	0,205	0,168
Zn	μg/L	283	43,6	275	283	221	48	12,2	11
рН		3,7	5,4	3,6	3,9	3,7	4,9	7,9	8,0

Tabell C.6. Koncentrationer Al, As, Ba, Ca, Cd, Co, Cr, Cu, Fe, K, Mg, Mn, Mo, Na, Ni, P, Pb, Si, Sr, V, Zn och pH för oxiderade specialprover i duplikat (dbl).

BILAGA D – Katjonbyteskapacitet

Katjonbyteskapaciteten för specialproverna beräknades från koncentrationerna Ca, Mg, K och Na från extraktion med 0,43 M HNO₃. I tabell D.1 presenteras medelvärden för duplikaten.

			-		-
Provnamn	Ca [cmolc/kg]	Mg [cmol _c /kg]	K [cmolc/kg]	Na [cmol _c /kg]	Total CEC
					[cmol _c /kg]
SSJ01B	10,5	8,72	1,74	3,79	24,7
SSJ03A	7,91	9,57	2,09	4,18	23,8
SSJ03B	7,67	7,53	1,74	3,74	20,7
REF01B	7,33	6,12	1,24	0,76	15,4

Tabell D.1. Beräknad total katjonbyteskapacitet (CEC) för specialproverna och koncentrationerna Ca, Mg, K och Na.

Katjonbyteskapaciteten för specialproverna beräknades också från bulkmineralogin erhållen med XRPD-analys, resultatet visas i tabell D.2.

Tabell D.2. Medianvärde för katjonbyteskapaciteten CEC för markkomponenterna (mineral och organiskt material) M_{CEC} (Rennert et al. 2020; Appelo & Postma 2004), fraktionen F av markkomponenten för jordarna SSJ01B, SSJ03B och REF01B, beräknad CEC för varje markkomponent samt total CEC.

Markkomponent	M _{CEC}	F _{SSJ01B}	F _{SSJ03B}	F _{REF01B}	CEC _{SSJ01B}	CEC _{SSJ03B}	CEC _{REF01B}
T Z 4	[CIIIOI _c /Kg]	(70)	(70)	(70)	[CIIIOI _c / Kg]	[CIIIOI _c / Kg]	[CIIIOI _c /Kg]
Kvarts	1,4	19,1	20,1	25,9	0,27	0,28	0,36
Plagioklas	0,9	14,6	16,2	17,7	0,13	0,15	0,16
Illit	30	18,3	17,2	15,2	5,49	5,16	4,56
Kalifältspat	3,7	10,7	12	12,7	0,40	0,44	0,47
Smektit	95	2,4	2,1	9,0	2,28	2,00	8,55
Muskovit	52	3,2	4,0	4,4	1,66	2,08	2,29
Klorit	26	4,1	4,6	3,8	1,03	1,15	0,95
Hydrobiotit	17	2,7	3,3	3,1	0,46	0,56	0,53
I/S-ML	52,5	0	3	2,4	0,00	1,58	1,26
Glimmer	17	4,1	4,5	2,2	0,70	0,77	0,37
Kaolinit	25	1,4	1,5	1,0	0,35	0,38	0,25
Kalcit	0,7	0,1	0	0,4	0,00070	0	0,0028
Pyrit	1,5	1,6	2,3	0	0,02	0,03	0
ТОС	275	3,11	3,23	0,92	8,55	8,88	2,53
Total CEC					21,34	23,45	22,28
[cmol _c /kg]							