

地表水--地下水交互对典型PFAS迁移转化的影响

郭芷琳,赵东伟,彭展翔,翟许辰

The impact of surface water-groundwater interactions on the fate and transport of typical PFAS

GUO Zhilin, ZHAO Dongwei, PENG Zhanxiang, and ZHAI Xuchen

在线阅读 View online: https://doi.org/10.16030/j.cnki.issn.1000-3665.202409027

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

地下水位波动带三氮迁移转化过程研究进展

Advances in researches on ammonia, nitrite and nitrate on migration and transformation in the groundwater level fluctuation zone 刘鑫, 左锐, 王金生, 何柱锟, 李桥 水文地质工程地质. 2021, 48(2): 27–36

水位波动下包气带透镜体影响LNAPL迁移的数值模拟研究

A numerical simulation study of the effect of the vadose zone with lenses on LNAPL migration under the fluctuating water table 潘明浩, 时健, 左锐, 赵晓, 刘嘉蔚, 薛镇坤, 王金生, 胡立堂 水文地质工程地质. 2022, 49(1): 154–163

地下水氮循环与砷迁移转化耦合的研究现状和趋势

Research status and trend of coupling between nitrogen cycle and arsenic migration and transformation in groundwater systems 郭华明, 高志鹏, 修伟 水文地质工程地质. 2022, 49(3): 153-163

黑河流域中游盆地地表水与地下水转化机制研究

Study on the conversion mechanism of surface water and groundwater in the middle reaches of the Heihe River Basin 祁晓凡, 李文鹏, 崔虎群, 康卫东, 刘振英, 邵新民 水文地质工程地质. 2022, 49(3): 29-43

半干旱地区地表--地下水系统水热运移与裸土蒸发研究

Hydrothermal transfer and bare soil evaporation in surface-groundwater systems in semi-arid areas 马稚桐, 王文科, 赵明, 黄金廷, 卢艳莹, 侯昕悦, 王一 水文地质工程地质. 2021, 48(4): 7-14

高放废物深地质处置地下水数值模拟应用综述

Review of groundwater numerical simulation for deep geological disposal of high-level radioactive waste 李露露, 张秋兰, 李星宇, 张璜, 崔亚莉, 邵景力 水文地质工程地质. 2022, 49(2): 43-53



关注微信公众号,获得更多资讯信息

DOI: 10.16030/j.cnki.issn.1000-3665.202409027

郭芷琳,赵东伟,彭展翔,等. 地表水-地下水交互对典型 PFAS 迁移转化的影响 [J]. 水文地质工程地质, 2025, 52(3): 1-13. GUO Zhilin, ZHAO Dongwei, PENG Zhanxiang, et al. The impact of surface water-groundwater interactions on the fate and transport of typical PFAS[J]. Hydrogeology & Engineering Geology, 2025, 52(3): 1-13.

地表水-地下水交互对典型 PFAS 迁移转化的影响

郭芷琳,赵东伟,彭展翔,翟许辰

(南方科技大学环境科学与工程学院,广东深圳 518055)

摘要:全氟和多氟烷基物质(per- and polyfluoroalkyl substances, PFAS)作为一种广泛存在、难降解、容易对饮用水和人体造成长期影响的污染物,引起人们广泛关注。有关 PFAS 在土壤中的运移过程研究在近十年已取得大量进展,但复杂水动力条件下 PFAS 在地下水中迁移转化的定量研究还较少。基于此,从变饱和流动条件下 PFAS 的迁移转化规律出发,选取全氟己基磺酸(perfluorohexane sulfonate, PFHxS)为研究对象,探究地层非均质性和水位波动条件对 PFHxS 在地下水中迁移转化的影响。通过模拟液相、固相吸附和空气-水界面吸附的 PFHxS 的迁移转化过程,探究河岸带区域地表水-地下水交互条件下的 PFHxS 迁移转化行为规律。研究表明:(1)非均质地层的局部高渗透区域产生了流动和运输的优先通道,加快了 PFHxS 向河岸带迁移的过程;(2)降雨引发的地表水-地下水交互作用过程导致了 PFHxS 污染羽的空间重新分配,并使得 PFHxS 污染区的覆盖范围得到了扩展;(3)非均质优先通道的存在加快了 PFHxS 在地表水-地下水相互作用中的响应速度。研究成果将有助于提高在类似复杂环境中预测污染范围扩展的准确性,优化监测和提出应对措施,为污染应急响应提供科学依据。

关键词:全氟和多氟烷基物质;水位波动;非均质性;迁移转化;数值模拟 中图分类号: P641.69 文献标志码: A 文章编号: 1000-3665(2025)03-0001-13

The impact of surface water-groundwater interactions on the fate and transport of typical PFAS

GUO Zhilin, ZHAO Dongwei, PENG Zhanxiang, ZHAI Xuchen

(School of Environmental Science and Engineering, Southern University of Science and Technology, Shenzhen, Guangdong 518055, China)

Abstract: Per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) are a class of ubiquitous and persistent pollutants that pose significant risks to drinking water and human health. Considerable progress has been made in understanding the transport processes of PFAS in soil over the past decade; however, there is a lack of quantitative studies on the migration and transformation of PFAS in groundwater under complex hydrodynamic conditions. This study, focusing on perfluorohexane sulfonate (PFHxS), investigated the migration and transformation mechanisms of PFAS under variably saturated flow conditions. The influence of stratum heterogeneity and water table fluctuations on the migration and transformation of PFHxS in groundwater was explored. By simulating the migration and transformation processes of PFHxS in the aqueous phase, solid phase, and air-water interface, the migration and transformation behavior patterns of PFHxS under surface water-groundwater interaction condition

收稿日期: 2024-09-10; 修订日期: 2024-10-29 投稿网址: www.swdzgcdz.com

基金项目: 深圳市科创委面上项目(JCYJ20210324105009024);广东省自然科学基金杰出青年项目(2024B1515020038)

第一作者:郭芷琳(1988一),女,博士,研究员,主要从事地下水模拟研究。E-mail: guozl@sustech.edu.cn

in riparian zone was investigated. The results show that high permeability areas of heterogeneous layers create preferential channels for flow and transport, accelerating the migration of PFHxS to riparian zones The interaction between surface water and groundwater caused by rainfall led to the spatial redistribution of PFHxS pollution plume and extended the coverage of PFHxS pollution area. The presence of preferential flow accelerates the response rate of PFHxS in the surface water-groundwater interaction. This study contributes to enhancing the accuracy of predicting the extent of pollution spread in similar complex environments, optimizing monitoring and response measures, and providing a scientific basis for pollution emergency management.

Keywords: PFAS; water level fluctuation; heterogeneity; migration and transformation; numerical simulation

全氟和多氟烷基物质(per- and polyfluoroalkyl substances, PFAS)是一类由氟和碳组成的化合物,美国环 境保护署将其认定为广泛存在且难降解的污染物,对 饮用水和人体健康造成长期影响¹¹。自 20 世纪 50 年 代以来, PFAS 及衍生的表面活性剂和聚合物已被广 泛应用于工业和商业领域,包括不黏涂料、纺织品、 纸制品和消防泡沫。PFAS 的大规模制造和使用导致 其在环境中广泛存在。在 PFAS 中存在的 C-F 键非常 强和稳定,且由于氟的强电负性和较小的原子尺寸, 使得全氟烷基部分(C_nF_{2n+1}⁻)具有强耐酸性以及极低浓 度下更高的表面活性剂和聚合物具有高度持久的特性^[2]。

PFAS 通过工厂污水排放、大气干湿沉降、含 PFAS 前体物质农药施用等途径进入土壤,经包气带下渗, 造成地表水和地下水污染。由于其具有较高的表面 活性, PFAS 常表现出区别于传统污染物的特性, 尤其 是在空气-水界面和固相界面发生吸附-解吸附过程。 大量研究表明,包括水饱和度、溶液组成、PFAS 类型 和浓度以及多孔介质属性在内的多种因素,均能够影 响 PFAS 的吸附强度,使其能够在地下环境中长期滞 留^[4-7]。Guo 等^[8]提出的关于 PFAS 在包气带中释放、 运输和滞留的数学模型,表明了空气-水界面吸附对 PFAS 在包气带滞留的重要影响。饱和度降低以及饱 和度降低所引起的空气-水界面面积增加都会增大 PFAS 在包气带的阻滞因子,其他对饱和度和空气-水 界面面积存在影响的因素也会间接影响 PFAS 的运输 和滞留。此外,具有强碳氟键的 PFAS 大多在环境中 难降解^[9],使得包气带滞留的 PFAS 成为了地下水污染 的长期来源之一^[10-15]。在包气带内, PFAS 可以在空 气-水-固三相界面发生复杂的转化,饱和度的变化进 一步影响这些界面过程¹⁶。在饱和带中, PFAS 的迁移 过程受到固相吸附过程的影响,延长了其滞留时间。

尽管过去关于 PFAS 在地下环境中的迁移机制已 经取得了许多进展,且相关模型也得到了较为完善的 开发^[8,17],但 PFAS 在地下环境中长期的滞留及其在饱 和带和非饱和带之间的转化和分布规律,尤其是在强 水位波动环境下,尚未得到充分研究。基于此,本文 将从变饱和流动条件 PFAS 的迁移转化规律出发,选 取典型 PFAS—全氟己基磺酸(perfluorohexane sulfonate, PFHxS),探究地层非均质性在水位波动条件下 对 PFHxS),探究地层非均质性在水位波动条件下 对 PFHxS 迁移转化的影响,表征地下水水位动态和地 层非均质性耦合的复杂水动力条件下 PFHxS 的迁移 和吸附-解吸附过程,阐明 PFAS 在河流、海岸带或其 他地下水水位季节动态明显区域的迁移转化规律,通 过模拟河岸带地表水与地下水的动态交互,特别是考 虑到河岸带冲积层的非均质性,深入分析 PFHxS 的迁 移与转化过程,从而为区域 PFAS 污染的防治和修复 提供可靠的理论依据和技术支持。

1 数值模拟

1.1 水文地质概念模型

河流附近废弃物填埋场渗漏的 PFAS, 以及城市 污水处理厂无法完全去除的 PFAS, 经处理后污泥回 填等因素, 都会导致 PFAS 在土壤中的积累。随着降 雨入渗, PFAS 进一步污染地下水和地表水。由于河 岸带区域复杂的地表水-地下水相互作用, PFAS 的实 际污染路径及影响范围难以精确刻画。基于此, 本 研究选取深圳市坪山河河岸带作为研究场地, 模拟 PFAS 长期从地表释放, 经包气带下渗至饱和带, 并向 河岸带迁移造成地表水-地下水污染的过程。

研究区为河岸带二维剖面,长 60 m,厚度 10 m。 下部为弱透水层基岩,中上部含水层厚约 7 m,沿河岸 带下部分布约 0.2 m 厚的冲积层。基岩 x、z 方向渗透 率均为 1×10⁻¹⁵ m²(渗透系数约为 8.476×10⁻⁴ m/d),含水 层 x、z 方向渗透率均为 1.055×10⁻¹² m²(渗透系数约为 0.894 m/d)。本次研究分别模拟 3 种地层条件,均质地 层(hom),河岸带冲积层与含水层属性相同;冲积层层 内均质地层(het1),x、z 方向渗透率均为 3.863 9×10⁻¹⁴ m² (渗透系数约为 0.0327 m/d);冲积层层内非均质地层 (het2),使用地球统计学方法生成高斯随机非均质渗 透场,渗透率均值为 3.863 9×10⁻¹⁴ m²,对数方差为 0.64 (表 1)。模型剖面以及边界条件和初始条件见图 1。 为了进一步观察水位波动时 PFHxS 的迁移过程,选 取了河岸带附近 9 个观察点(图 2),分别观察非饱和 带、地表水-地下水交互带和饱和带的 PFHxS 迁移转 化行为。

表 1 研究区水文地质参数和水力参数(het1) Table 1 Hydrogeological parameters and hydraulic parameters in the study area (het1)

参数	透水层	基岩	冲积层(het1)
孔隙度	0.43	0.2	0.43
渗透率/m²	1.055×10^{-12}	1×10^{-15}	3.863 9×10 ⁻¹⁴
渗透系数/(m·d ⁻¹)	0.894	8.476×10 ⁻⁴	0.032 7
密度/(kg·m ⁻³)	2.65×10 ³	2.76×103	2.65×10 ³
弯曲度	1	1	1
VG模型参数a/Pa ⁻¹	3.57×10 ⁻⁴	3.57×10 ⁻⁴	1.431 9×10 ⁻⁴
VG模型参数n	1.400 0	1.400 0	3.966 7
VG模型参数m	0.285 7	0.285 7	0.747 9
残余含水量/(cm ³ ·cm ⁻³)	0.01	0.01	0.129 9



图 1 河岸带二维地质剖面以及边界条件和初始条件 Fig. 1 Two-dimensional geological profile of the riparian zone and boundary and initial conditions

注: h_{iv} 为河水水位; h_{iw} 为左侧边界地下水水位; C 为污染物释放浓度; v 为 入渗速率。



图 2 考虑的两种不同河岸带非均质冲积层和河岸带附近 9 个观 察点选取位置



1.2 数学模型

水动力模型采用 RICHARDS 方程。RICHARDS 方程是土壤科学和地下水水文学中描述土壤或多孔 介质中非饱和水流动的偏微分方程。其中,质量守恒 控制方程为:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi s\eta) + \nabla \cdot (\eta q) = Q_{\rm w} \tag{1}$$

达西通量定义为:

$$q = -\frac{kk_{\rm r}(s)}{\mu}\nabla(P - \rho gz) \tag{2}$$

式中:
$$\phi$$
——孔隙度;
 s ——饱和度/(m³·m⁻³);
 η ——水的摩尔密度/(kmol·m⁻³);
 Q_w ——源汇项/(kmol·m⁻³·s⁻¹);
 ρ ——水的质量密度/(kg·m⁻³);
 q ——达西通量/(m·s⁻¹);
 k ——固有渗透率/m²;
 k_r ——相对渗透率;
 μ ——黏度/(Pa·s);
 P ——压强/Pa;
 g ——重力加速度/(m·s⁻²)。

水的密度和黏度是通过水的状态方程作为温度 和压力的函数来计算的。源汇项(Q_w)的形式为:

$$Q_{\rm w} = \frac{q_{\rm M}}{W_{\rm w}} \delta(r - r_{\rm ss}) \tag{3}$$

式中: q_M——质量速率/(kg·m⁻³·s⁻¹);

 W_{w} ——水的摩尔质量/(g·mol⁻¹);

 $\delta(r-r_{ss})$ ——狄拉克函数,源汇项位置为 r_{ss} 。

PFAS 的迁移转化模型通过带有固相和空气-水界 面吸附项的平流-弥散方程描述^[8]:

$$\frac{\partial (\theta C)}{\partial t} + \rho_{\rm b} \frac{\partial C_{\rm s}}{\partial t} + \frac{\partial C_{\rm aw}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} (\theta v C) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\theta D \frac{\partial C}{\partial z} \right) = 0$$

$$v = q/\theta, \quad D = \alpha_L v + \tau D_0 \tag{4}$$

式中: v——孔隙水实际流速/(cm·s⁻¹);

C——溶液中 PFAS 浓度/(umol·cm⁻³);

 C_{aw} ——空气-水界面吸附浓度/(μ mol·cm⁻³);

$$C_{s}$$
——固相吸附浓度/(μ mol·g⁻¹);

θ——体积含水率/(cm³·cm⁻³);

 $\rho_{\rm b}$ ——体积密度/(g·cm⁻³);

 $\alpha_{\rm L}$ ——纵向弥散度/cm;

D----弥散系数/(cm²·s⁻¹);

$$D_0$$
——水中的自由分子扩散系数/(cm²·s⁻¹);

τ——弯曲度。

本次研究,采用 Guo 等^[18]提出的简化模型。主要做出 2 点假设进行简化。

①假设固相吸附可以用线性等温线近似:

$$C_{\rm s,1} = F_{\rm s} K_{\rm d} C \tag{5}$$

$$\frac{dC_{s,2}}{dt} = \alpha_{s} \left[(1 - F_{s}) K_{d} C - C_{s,2} \right]$$
(6)

式中: $C_{s,1}$ ——瞬时吸附域中的吸附浓度/(μ mol·g⁻¹);

 $C_{s,2}$ —动力学吸附域中的吸附浓度/(μ mol·g⁻¹);

F_s——瞬时吸附的吸附剂的比例;

- K_d ——固相吸附系数/(cm³·g⁻¹);
- α_s ——动力学吸附的一阶速率常数/s⁻¹。

②假设空气-水界面吸附平衡。在空气-水界面吸 附平衡假设条件下,式(4)中空气-水界面上的吸附浓 度(*C*_{aw})为表面过剩量(Γ)与空气-水界面面积(*A*_{aw}) 的乘积^[19-20]:

$$C_{\rm aw} = \Gamma A_{\rm aw} \tag{7}$$

式中: Γ —表面过剩量/(μ mol·cm⁻²),是水溶液浓度的函数, $\Gamma = K_{aw}C$;

$$A_{aw}$$
——空气-水界面面积/(cm²·cm⁻³);

K_{aw}——空气-水界面吸附系数/(cm³·cm⁻²),在理想 稀释溶液假设下(即低于临界胶束浓度), 可根据吉布斯方程计算:

$$K_{\rm aw} = \frac{\Gamma}{C} = -\frac{1}{\chi R_{\rm g} T C} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial \ln C}\right) \tag{8}$$

式中: Rg——通用气体常数/(J·K⁻¹·mol⁻¹);

T---温度/K;

 χ — 对于非离子型 PFAS 或离子型 PFAS,在存在 大量电解质的情况下,其χ系数为1,对于没 有大量电解质的离子型 PFAS,其χ系数为2;
 σ — 表面张力系数。

空气-水界面面积由 2 种类型组成,包括与大量空 气和水之间的弯月面相关的毛细界面和与颗粒表面 周围的湿润膜相关的膜相关界面,这 2 种类型都与 PFAS 迁移有关^[21-23]。本次研究考虑两者的结合,即 总空气-水界面面积。将 *A*_{aw} 近似为含水饱和度的二 阶多项式函数:

$$A_{\rm aw} = x_2 S_{\rm w}^2 + x_1 S_{\rm w} + x_0 \tag{9}$$

- 式中: x₂、x₁、x₀——可以通过拟合水界面示踪方法测 量的空气-水界面面积数据确定 的参数。
 - 单个 PFAS 溶液的表面张力系数 (σ)可以用

Szyszkowski 方程表示:

$$\sigma = \sigma_0 \left[1 - b \ln \left(1 + \frac{C}{a} \right) \right] \tag{10}$$

将式(10)代入式(8):

$$K_{\rm aw} = \frac{1}{\chi R_{\rm g} T} \frac{\sigma_0 b}{a+C} \tag{11}$$

式中: σ_0 ——不溶性 PFAS 溶液的表面张力/(dyn·cm⁻¹); a_b ——拟合试验数据的参数。

将上述简化过程带入式(3),得到简化的描述 PFAS 迁移转化过程的线性平流-弥散方程:

$$\beta R \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\rho_{\rm b} \alpha_{\rm s}}{\theta} \left[(1 - F_{\rm s}) K_{\rm d} C - C_{\rm s,2} \right] + \frac{\partial}{\partial z} (\nu C) - \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial C}{\partial z} \right) = 0$$
(12)

其中,阻滞因子 $R = 1 + R_s + R_{aw}, \beta = (1 + F_s R_s + R_{aw})/R_o$ $R_s = \rho b K_d / \theta \pi R_{aw} = K_{aw} A_{aw} / \theta$ 分别表示固相和空气-水界 面吸附阻滞因子。

本研究验证了垂向一维饱和均质情景下的 PFHxS 迁移转化过程的质量平衡。使用地下水反应性溶质运 移模型 PFLOTRAN 进行模拟,模拟时间设置为 100 d, 垂向精度 0.1 m。初始时间步长为 0.01 h,最大时间步 长为 0.1 d,确保数值稳定性和精确性。模拟持续性污 染源释放,通过 PFHxS 在 100 d 内的累积通量与剖面 内污染物总量(包括液相、固相吸附和空气-水界面吸 附的 PFHxS)观测对比分析,评估质量平衡。质量平 衡相对误差的阈值设定为 1%,质量平衡误差主要集 中在模拟初期,随着系统逐渐趋于稳定,模拟结果显 示在整个模拟期间相对误差控制在该阈值以内,约为 0.763%,进一步验证了模型的可靠性。

1.3 数值模型构建

1.3.1 模型边界条件和初始条件

使用地下水反应性溶质运移模型 PFLOTRAN 模 拟 PFAS 在地下水中的迁移转化过程。设置剖面左边 界为地下水水位边界,右边界为河流边界(图1)。在 PFHxS 释放期,左、右边界均应用静水压条件,均设定 为 I 类边界,左边界地下水水位设置 DATUM 为27.5 m, 右边界河水位设置 DATUM 为27 m,水力梯度约为0.01。 上边界模拟 PFHxS 持续输入,设定"NEUMANN"边 界,通量设置为6.21×10⁻³ m/d。在水位波动时期,右边界 设置为"Seepage"边界,根据河水位变化设置 DATUM (图3)。左边界设为静水压力条件,地下水水位 DATUM 变化如图3 所示。上边界停止 PFHxS 输入,仅模拟降 雨入渗,依据降雨量变化(图3)设置通量变化。释放 期模拟 PFHxS 以 2.5×10⁻¹⁰ mol/L 的浓度从地表持续释放 10 a,水位波动时期停止 PFHxS 输入。在 PFHxS 释放期和水位波动时期,研究区初始条件均采用静水压力(hydrostatic)条件,DATUM 设置为 27 m。研究

区初始 PFHxS 背景浓度设置为 1×10^{-20} mol/L。在剖面 x = 5 m 处,从地表至地下 3 m 有初始 PFHxS 分布。以 持续释放 10 a 后的浓度分布作为水位波动时期的初 始 PFHxS 浓度分布。





1.3.2 模拟过程及求解

应用数值模拟方法对该假想模型进行数值模拟, 主要分为2个阶段。第1阶段, PFHxS释放期。在此 阶段中,模拟河岸带附近 PFHxS 长期从地表持续释 放 10 a, 经包气带下渗至饱和带, 并向河岸带迁移造成 地表水-地下水污染的过程,得出研究区内 PFHxS 的 分布规律和不同地层条件对 PFHxS 分布的影响。第 2阶段,水位波动时期。在此阶段中,以PFHxS持续 释放 10 年后的 PFHxS 浓度分布为初始条件,停止地 表 PFHxS 输入,模拟降雨引起的地表水-地下水交互 过程下 PFHxS 的迁移转化过程。降雨过程及边界地 下水水位和河水水位如图 3,模拟时间共 262 d,其中 主要发生了3次强降雨过程。随着降雨的发生,地表 水与地下水之间的补给关系发生显著变化,河水逐渐 转变为向地下水补给。在3次强降雨期间,河水对地 下水的补给强度显著增加。降雨过程中,水位随降雨 量的变化而波动,波动的幅度和频率随之变化。水位 波动的最大幅度可达2m,降雨的强度与持续时间直 接影响水位上升或下降的速度,进而影响波动频率。 当降雨量大且集中时,水位波动频率加快;相反,在降 雨减少或间歇时,波动频率趋于减缓。

模拟研究区 x 方向 60 m, z 方向 10 m。综合考虑 模拟区范围、计算量大小,模拟区空间离散采用均匀 网格, $\Delta x = 0.1$ m, $\Delta z = 0.1$ m,将剖面划分为 600×100 个 均匀网格。PFHxS 释放期模拟时间为 10 年,水位波 动时期模拟时间为 262 d。综合考虑数值稳定性条件 和模拟精度,最小时间步长设置为 1 h,最大时间步长 不超过 10 d。使用牛顿求解器(NEWTON_SOLVER) 求解非线性方程。

PFAS 分布包括液相、固相界面吸附(瞬时吸附过 程和动力学吸附过程)和空气-水界面吸附的 PFAS。 对于某一离散网格,其 PFAS 总浓度(多孔介质单位体 积的总量,包括液相、吸附在固相界面和空气-水界面 的量,计算公式为:

$$C_{\text{tot},i} = C_{\text{aq},i} + \rho_{\text{b}} C_{\text{s},i} + C_{\text{aw},i}$$
(13)

其中, $C_{aq,i} = C_i \theta_i = C_i \phi_i S_{w,i}$ 表示液相浓度; $C_{s,i} = C_{(s,1),i} + C_{(s,2),i}$ 表示固相吸附的浓度; $C_{aw,i} = A_{aw,i} \Gamma_i = A_{aw,i} K_{aw,i} C_i$ 表示空气-水界面吸附的浓度。

模型相关参数设定见表2。

表 2 模型相关参数 Table 2 Relevant parameters of the model

参数 取值 $a/(\text{mg} \cdot \text{L}^{-1})$ 160.05 b 0.14 摩尔质量/(g \cdot \text{mol}^{-1}) 400.12 分子扩散系数/(cm ² \cdot s^{-1}) 4.5×10 ⁻⁶ $C_0/(\text{mg} \cdot \text{L}^{-1})$ 1×10 ⁻⁴ $K_d/(\text{cm}^3 \cdot \text{g}^{-1})$ 0.28 F_s 0.1 线性化参数 $K_f/[(\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}) \cdot (\text{mg} \cdot \text{L}^{-1})^N]$ 0.021 3 线性化参数 (N) 0.81 α_s/h^{-1} 3.1 x_2 548.54 x_1 -1 182.5 x_0 633.96 χ 2 $R_g/(J \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$ 8.314 温度 / K 298.15 $\sigma_0/(\text{dyn} \cdot \text{cm}^{-1})$ 72		
$a/(mg \cdot L^{-1})$ 160.05 b 0.14 摩尔质量/(g \cdot mol^{-1}) 400.12 分子扩散系数/(cm ² · s^{-1}) 4.5×10 ⁻⁶ $C_0/(mg \cdot L^{-1})$ 1×10 ⁻⁴ $K_d/(cm^3 \cdot g^{-1})$ 0.28 F_s 0.1 线性化参数 $K_f/[(mg \cdot kg^{-1}) \cdot (mg \cdot L^{-1})^N]$ 0.021 3 线性化参数 (N) 0.81 α_s/h^{-1} 3.1 x_2 548.54 x_1 -1 182.5 x_0 633.96 χ 2 $R_g/(J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1})$ 8.314 温度/K 298.15 $\sigma_0/(dyn \cdot cm^{-1})$ 72	参数	取值
b 0.14 摩尔质量/(g·mol ⁻¹) 400.12 分子扩散系数/(cm ² ·s ⁻¹) 4.5×10 ⁻⁶ $C_0/(mg·L^{-1})$ 1×10 ⁻⁴ $K_d/(cm^3·g^{-1})$ 0.28 F_s 0.1 线性化参数K _f /[(mg·kg ⁻¹)·(mg·L ⁻¹) ^N] 0.021 3 线性化参数(N) 0.81 α_s/h^{-1} 3.1 x_2 548.54 x_1 -1 182.5 x_0 633.96 χ 2 $R_g/(J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1})$ 8.314 温度/K 298.15 $\sigma_0/(dyn \cdot cm^{-1})$ 72	$a/(\mathrm{mg}\cdot\mathrm{L}^{-1})$	160.05
摩尔质量/(g·mol ⁻¹) 400.12 分子扩散系数/(cm ² ·s ⁻¹) 4.5×10^{-6} $C_0/(\text{mg}\cdot L^{-1})$ 1×10^{-4} $K_d/(\text{cm}^3 \cdot \text{g}^{-1})$ 0.28 F_s 0.1 线性化参数 $K_f/[(\text{mg}\cdot \text{kg}^{-1}) \cdot (\text{mg} \cdot \text{L}^{-1})^N]$ $0.021 3$ 线性化参数 (N) 0.81 α_s/h^{-1} 3.1 x_2 548.54 x_1 $-1 182.5$ x_0 633.96 χ 2 $R_g/(J \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$ 8.314 温度/K 298.15 $\sigma_0/(\text{dyn}\cdot\text{cm}^{-1})$ 72	b	0.14
分子扩散系数/(cm ² ·s ⁻¹) 4.5×10 ⁻⁶ $C_0/(\text{mg} \cdot \text{L}^{-1})$ 1×10 ⁻⁴ $K_d/(\text{cm}^3 \cdot \text{g}^{-1})$ 0.28 F_s 0.1 线性化参数 $K_f/[(\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}) \cdot (\text{mg} \cdot \text{L}^{-1})^N]$ 0.021 3 线性化参数 (N) 0.81 α_s/h^{-1} 3.1 x_2 548.54 x_1 -1 182.5 x_0 633.96 χ 2 $R_g/(\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$ 8.314 温度 /K 298.15 $\sigma_0/(\text{dyn} \cdot \text{cm}^{-1})$ 72	摩尔质量/(g·mol ⁻¹)	400.12
$C_0/(\text{mg}\cdot\text{L}^{-1})$ 1×10^{-4} $K_d/(\text{cm}^3 \cdot g^{-1})$ 0.28 F_s 0.1 线性化参数 $K_f/[(\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}) \cdot (\text{mg}\cdot\text{L}^{-1})^N]$ $0.021 3$ 线性化参数 (N) 0.81 α_s/h^{-1} 3.1 x_2 548.54 x_1 $-1 182.5$ x_0 633.96 χ 2 $R_g/(J \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$ 8.314 温度/K 298.15 $\sigma_0/(\text{dyn}\cdot\text{cm}^{-1})$ 72	分子扩散系数/(cm ² ·s ⁻¹)	4.5×10 ⁻⁶
$K_d/(cm^3 \cdot g^{-1})$ 0.28 F_s 0.1 线性化参数 $K_f/[(mg \cdot kg^{-1}) \cdot (mg \cdot L^{-1})^N]$ 0.021 3 线性化参数 (N) 0.81 α_s/h^{-1} 3.1 x_2 548.54 x_1 -1 182.5 x_0 633.96 χ 2 $R_g/(J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1})$ 8.314 温度/K 298.15 $\sigma_0/(dyn \cdot cm^{-1})$ 72	$C_0/(\mathrm{mg}\cdot\mathrm{L}^{-1})$	1×10^{-4}
F_s 0.1 线性化参数 $K_f/[(mg \cdot kg^{-1}) \cdot (mg \cdot L^{-1})^N]$ 0.021 3 线性化参数 (N) 0.81 α_s/h^{-1} 3.1 x_2 548.54 x_1 -1 182.5 x_0 633.96 χ 2 $R_g/(J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1})$ 8.314 温度/K 298.15 $\sigma_0/(dyn \cdot cm^{-1})$ 72	$K_{\rm d}/({\rm cm}^3\cdot{\rm g}^{-1})$	0.28
线性化参数 $K_f/[(mg \cdot kg^{-1}) \cdot (mg \cdot L^{-1})^N]$ 0.021 3 线性化参数 (N) 0.81 α_s/h^{-1} 3.1 x_2 548.54 x_1 -1 182.5 x_0 633.96 χ 2 $R_g/(J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1})$ 8.314 温度/K 298.15 $\sigma_0/(dyn \cdot cm^{-1})$ 72	Fs	0.1
线性化参数 (N) 0.81 α_s/h^{-1} 3.1 x_2 548.54 x_1 -1 182.5 x_0 633.96 χ 2 $R_g/(J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1})$ 8.314 温度/K 298.15 $\sigma_0/(dyn \cdot cm^{-1})$ 72	线性化参数K _f /[(mg·kg ⁻¹)·(mg·L ⁻¹) ^N]	0.021 3
	线性化参数(N)	0.81
x_2 548.54 x_1 -1 182.5 x_0 633.96 χ 2 $R_g/(J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1})$ 8.314 温度/K 298.15 $\sigma_0/(dyn \cdot cm^{-1})$ 72	$lpha_{ m s}/{ m h}^{-1}$	3.1
x_1 -1 182.5 x_0 633.96 χ 2 $R_g/(J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1})$ 8.314 温度/K 298.15 $\sigma_0/(dyn \cdot cm^{-1})$ 72	x_2	548.54
x_0 633.96 χ 2 $R_g/(J \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$ 8.314 温度/K 298.15 $\sigma_0/(\text{dyn} \cdot \text{cm}^{-1})$ 72	x_1	-1 182.5
χ 2 $R_g/(J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1})$ 8.314 温度/K 298.15 $\sigma_0/(dyn \cdot cm^{-1})$ 72	x_0	633.96
$R_g/(J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1})$ 8.314 温度/K 298.15 $\sigma_0/(dyn \cdot cm^{-1})$ 72	X	2
温度/K 298.15 σ₀/(dyn⋅cm ⁻¹) 72	$R_{\rm g}/({\rm J}\cdot{\rm mol}^{-1}\cdot{\rm K}^{-1})$	8.314
$\sigma_0/(\mathrm{dyn}\cdot\mathrm{cm}^{-1})$ 72	温度/K	298.15
	$\sigma_0/(\mathrm{dyn}\cdot\mathrm{cm}^{-1})$	72

2 结果

通过数值模拟,研究不同地层条件下 PFHxS 的迁移转化过程,重点分析了地层非均质性及降雨引发的地表水-地下水交互作用对 PFHxS 迁移转化的影响。 模拟方案分为2个阶段:第1阶段模拟无降雨或地表 水入渗条件下, PFHxS 点状污染源持续向地下释放至 包气带和饱和带的迁移过程,探索不同地层条件下 PFHxS 的分布特征;第2阶段以第1阶段模拟结果为 初始条件,模拟降雨诱发的地表水-地下水交互作用 下 PFHxS 迁移与转化的动态过程,分析降雨强度、频 率变化等引起的水动力条件变化及河岸带非均质性 对 PFHxS 迁移转化的影响。

2.1 PFHxS从地表释放经包气带到饱和带的全过程数值模拟

PFHxS 持续释放期(模拟第1阶段),hom、het1 和 het2 地层条件下产生的流场分布如图 4。可以观察 到,不同条件下,剖面流场分布大致相似,但在河岸带 冲积层附近,由于地层非均质性的影响,流场分布有 所不同,总体而言,地层非均质性增加了流场的复杂性。





图 5 分别比较了 PFHxS 释放第 3 年、第 6 年、第 10 年时,地下环境中液相、固相吸附和空气-水界面吸附 的 PFHxS 的分布情况。考虑到本次研究非均质性主 要体现在河岸带附近冲积层,因此主要观察释放后期 冲积层非均质性对 PFHxS 迁移转化的影响。PFHxS

以 2.5×10⁻¹⁰ mol/L 的浓度从地表污染点源持续释放, 经过约6年污染羽扩散至河岸带附近。随着 PFHxS 的持续释放,在包气带 PFHxS 的主要滞留区域:液相 PFHxS浓度约为 6.7×10⁻¹¹ mol/L; 固相吸附的 PFHxS 浓度约为1×10⁻¹⁰ mol/L; 空气-水界面吸附的 PFHxS 浓度与饱和度密切相关,在接近地下水面的区域, 空气-水界面吸附的 PFHxS 浓度急剧减少,约为 1× 10⁻¹⁴ mol/L。而在远离地下水面的区域,空气-水界面 吸附的 PFHxS 浓度可达 1×10⁻¹¹ mol/L。以往研究表 明, PFAS 链增长, PFAS 在包气带的滞留时间增加^[24]。 本次研究所考虑的 PFHxS 为人造短链 PFAS,因此在 包气带的滞留作用较弱。包气带阻滞因子受到含水 率的影响,阻滞因子 R 的范围为 2.00~4.22。定义 $f_s = R_s/(R-1)$ 表示固相吸附所贡献的占比, $f_{aw} = R_{aw}/$ (R-1)表示空气-水界面吸附所贡献的占比。在包气 带 PFHxS 的主要滞留区域, f.的范围为 77.03%~100%, faw的范围为0~22.97%。越靠近潜水面,含水率越高, 空气-水界面吸附对 PFHxS 滞留在包气带的贡献越 低。同时,在 PFHxS 从地表释放经过包气带的过程 中,也观察到有明显的横向迁移过程。

2.2 地表水-地下水交互条件下的 PFHxS 迁移转化过程

通过对比降雨诱发的地表水-地下水交互过程与 无降雨过程,进一步探究水位波动对 PFAS 迁移转化 的影响。模拟时间持续 262 d,期间发生多次强降雨过 程,地表水、地下水水位波动剧烈。在降雨过程中选 取第 20天(初期)、第 100天(强降雨时段)、第 165 天 (强降雨时段)和第 240 天(末期)绘制该时段剖面流 场图。如图 6 所示,在降雨初期,地下水水位高于地 表水水位,地下水向地表水补给,流场分布变化不大, 水动力场较为稳定。然而,随着降雨量的增加和降雨 的持续,河水位逐渐升高,超过了地下水水位,导致地 表水开始向地下水补给。补给关系的变化和降雨引 起的水位波动导致流速的增大,形成了复杂的水动力 相互作用,尤其是在河岸带冲积层附近的非均质高渗 透区域,形成了优先通道,水流速度明显增加,流场分 布变得更加复杂。

地下水动力场的变化直接影响了 PFHxS 污染物 的迁移和转化。降雨诱发的地表水-地下水交互过 程引起地下环境中饱和度等因素的快速变化,而这些 因素与 PFHxS 的迁移转化过程紧密相关。饱和度的 增加将破坏空气-水界面,加快空气-水界面 PFHxS 的 解吸附过程^[25]。通过观察地表水-地下水交互作用时 地下环境中的 PFHxS 浓度相较于初始时刻的 PFHxS



 $\lg[C_v/(\text{mol}\cdot L^{-1})]$

图 5 PFHxS 持续释放第 3 年、第 6 年、第 10 年均质(hom)、冲积层层内均质(het1)和冲积层层内非均质(het2)时液相、固相吸附和 空气-水界面吸附的 PFHxS 浓度分布

Fig. 5 Distribution of PFHxS at aqueous phase, solid phase adsorption, and air-water interface at 3, 6, and 10 years of continuous release of PFHxS (hom, het1 and het2 in alluvial layer)

浓度分布(图7),可以发现,由于流向和流速的变化, PFHxS 从浅层地下水向深层和远离河岸带的方向 迁移。

通过河岸带观察点的进一步详细观测发现,当地 表水水位高于地下水水位时,地表水向地下水补给, 河岸带附近 PFHxS 快速减少, 而远离河岸带的区域, 观察到 PFHxS 浓度的减少程度较小, 甚至在短期内出 现浓度上升(图 8)。浓度上升主要是由于河岸带中的 PFHxS 被冲刷并迁移至此所导致。但随着近河岸带 区域的 PFHxS 冲刷耗尽以及地表水-地下水交互过程 加强,距离河岸带较远区域的 PFHxS 逐渐降低。同 时,非均质地层的存在将影响 PFHxS 地表水-地下水 交互过程的响应时间。与均质地层相比,非均质低渗 透层的存在延缓了 PFHxS 的迁移转化行为,而非均质 高渗透区域产生的优先通道则加快了 PFHxS 向距离 河岸带较远区域的迁移转化。在地表水与地下水交

互过程中,河岸带附近的 PFHxS 明显受到水流冲刷的 影响,导致其浓度显著减少。这种现象不仅发生在液 相 PFHxS, 也同样影响到吸附在固相界面和空气-水界 面上的 PFHxS, 使其解吸附过程同样显著。当存在非 均质优先通道时,水位波动将加快通道处的空气-水界 面面积的破坏和固相界面 PFHxS 的解吸附过程,进一 步加快 PFHxS 解吸附过程, 使得 PFHxS 加速转化迁 移。总体而言,非均质优先通道的存在加快了 PFHxS 在地表水-地下水相互作用中的响应速度。经过降雨 诱发的地表水-地下水交互过程后,地下环境中 PFHxS 逐渐向远离河岸带区域和地下水较深部迁移, PFHxS 污染羽的范围增大。

3 讨论

本次研究模拟和分析了河岸带区域 PFHxS 从地 表释放到包气带、进而到达饱和带的过程。重点研究



图 7 地表水-地下水交互过程时地下环境中的 PFHxS 浓度相较于初始时刻的 PFHxS 浓度分布

Fig. 7 PFHxS concentration in the subsurface environment during the surface water-groundwater interaction compared with the PFHxS concentration distribution at the initial moment

地下水中 PFHxS 的 3 种不同分布形态——液相、固相 吸附以及在空气-水界面吸附 PFHxS 的浓度及其吸附 特性。此外,研究还考虑了地层非均质性对 PFHxS 迁 移和转化的可能影响,以提供更加全面的模拟。在形 成 PFHxS 污染羽后,通过模拟降雨事件诱导的地表水 与地下水的相互作用过程,探究地下水水位动态和地 层非均质性耦合条件下 PFHxS 在地下水系统中的迁 移转化特征。

3.1 非均质优先通道加快 PFHxS 迁移过程 非均质高渗透体的存在会产生流动和运输的优



地下水交互过程中的变化曲线

Fig. 8 Under different formation conditions, the concentration change curves of total PFHxS concentration per unit volume, aqueous phase concentration, solid phase adsorption concentration, and air-water interface adsorption concentration during the surface water-groundwater interaction

注: (a)—(i)对应所选取的不同观察点位置 (x, z)。

先通道^[26-27], 在模拟第 1 阶段 PFHxS 持续释放过程中, 选取 x = 42 m 截面, 观察 PFHxS 到达时间, 探究地层非均质性对 PFHxS 迁移转化的影响。如图 9 所示, 在均质地层 hom、冲积层层内均质地层(相对低渗层)het1、冲积层层内非均质地层(局部高渗透区域)het2 三种地层条件下, 观察 PFHxS 迁移至 x = 42 m 截面处的到达时间: hom 地层条件需要 5.6 a, het1 地层条件需要 7.0 a, het2 地层条件需要 5.5 a。可以发现, het2 地层的局部高渗透区域产生了流动和运输的优先通道,

加快了 PFHxS 向河岸带迁移的过程。这是由于高渗 透区域具有更低的水力阻力,使得污染物能够更快、 更集中地沿着这些通道迁移,从而缩短了污染物扩散 至目标区域的时间。此外,优先通道的存在不仅加速 了液相中 PFHxS 的迁移,还增强了地下环境中固相界 面和空气-水界面上的解吸附过程,使得被吸附的 PFHxS 更容易进入水相参与迁移。这种效应进一步 加快了 PFHxS 的迁移速率,扩大了河岸带区域的污染 范围。因此,高渗透区域的非均质性对污染物的迁移





具有显著的促进作用,直接影响了污染羽的形态和污染物的时间分布特征^[28]。

3.2 水位波动和非均质性耦合复杂条件对 PFHxS 迁 移转化的影响 在水位波动和不同地层条件导致的不同地下水 动力场条件下,污染物的迁移路径、速度和浓度变化 都有所不同。通过观察第99天时不同地层河岸带附 近的流速分布(图10)以及水动力场变化后,河岸带附 近 PFHxS 分布(图11),可以发现,对于均质地层,污 染物的迁移速度较为均匀,受水动力场变化的影响相 对较小。而低渗透层延缓了污染物的迁移,降低了地 表水和地下水间的交互速度,污染物在这些区域的累 积时间更长。在高渗透区域(优先通道),流速的增大 通常伴随着含水率的快速变化和 PFHxS 的加快迁移

淋出[27],加速了污染物的迁移。





考虑到本次研究选取的 PFHxS 为一种短链 PFAS, 其在土壤介质中的阻滞因子较低,因此在河岸带附近 受到水流冲刷时,响应速度快,迁移转化过程也更为 显著。在部分区域,由于较强的冲刷作用,PFHxS 被 冲刷耗尽。而对于长链 PFAS,其滞留因子通常较高, 因此在河岸带地区地表水与地下水的交互作用下,长 链 PFAS 的吸附-解吸附过程仍需进一步深入研究。 同时,本次研究所考虑的地表水-地下水交互过程主要 集中在降雨引发的地表水补给地下水,而在实际情景 中,地表水与地下水之间的补给关系受到气候、季节 和人类活动等因素的复杂控制,在更为复杂的水位波 动条件下,PFAS 的迁移转化行为尚需进一步研究。

4 结论

(1)本次模拟研究区为河岸带区域,土壤含水率



图 11 不同地层条件下,随着地表水补给地下水(60 d)以及一次较长时间的强降雨过程后(115 d),河岸带附近 PFHxS 分布 Fig. 11 Under different stratigraphic conditions, the distributions of PFHxS near the riparian zone following surface water recharge to groundwater (60 days) and after a prolonged heavy rainfall event (115 days)

较高,空气-水界面吸附对 PFHxS 的阻滞贡献占比较低,约为10%。此外,对于在饱和带中的 PFHxS 迁移转化过程,非均质地层的局部高渗透区域产生了流动和运输的优先通道,加快了 PFHxS 向河岸带迁移的过程。

(2)降雨引发的地表水-地下水交互作用过程导致 了 PFHxS 污染羽的空间重新分配,扩展了 PFHxS 污染 区的覆盖范围。降雨诱发的地表水-地下水交互作用 引起地下环境中饱和度等因素的快速变化,显著增加 PFHxS 在固相界面和空气-水界面的解吸附过程。随 着水位波动的加剧,沿水流路径 PFHxS 浓度呈降低趋 势, PFHxS 逐渐从地下水浅部向深部和远离河岸带的 方向迁移。

(3)非均质优先通道的存在加快了 PFHxS 在地表 水-地下水相互作用中的响应速度。在河岸带附近区 域,当降雨引发地表水-地下水交互作用时,河岸带附 近的 PFHxS 明显受到水流冲刷的影响,导致其浓度显 著减少。这种现象不仅发生在液相 PFHxS,也同样影 响到吸附在固相界面和空气-水界面上的 PFHxS,使其 解吸附过程同样显著。当存在非均质优先通道时,水 位波动将加快通道处的空气-水界面面积的破坏和固 相界面 PFHxS 的解吸附过程,进一步加快 PFHxS 解吸 附过程,使得 PFHxS 加速迁移转化。 研究揭示了河岸带复杂地层和水动力条件对 PFHxS迁移的显著影响,特别是在非均质地层优先通 道中的加速作用。这一结果提高了在类似复杂环境 中预测污染范围扩展的准确性,有助于及早识别高风 险区域,从而实施有效的预防性管理。研究成果不仅 有助于构建更精确的污染扩散模型,优化监测和应对 措施,还为污染应急响应提供了科学依据。

参考文献(References):

- BUCK R C, FRANKLIN J, BERGER U, et al. Perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances in the environment: Terminology, classification, and origins[J]. Integrated Environmental Assessment and Management, 2011, 7(4): 513 – 541.
- [2] 王佩,黄欣怡,曹致纬,等.新污染物共排放对生态环境监测和管理的挑战[J].环境科学,2022,43(11):4801 4809. [WANG Pei, HUANG Xinyi, CAO Zhiwei, et al. Challenges regarding the co-emission of emerging pollutants to eco-environmental monitoring and management[J]. Environmental Science, 2022, 43(11):4801-4809. (in Chinese with English abstract)]
- [3] 金宵卉, 阎妮. 全氟及多氟烷基化合物前体物质在环境中迁移与转化行为研究进展[J]. 水文地质工程地质, 2024, 51(2): 35 49. [JIN Xiaohui, YAN Ni.

Advances in researches on migration and transformation behavior of per-and polyfluoroalkyl substances precursors in the environment[J]. Hydrogeology & Engineering Geology, 2024, 51(2): 35 – 49. (in Chinese with English abstract)]

- BRUSSEAU M L. Assessing the potential contributions of additional retention processes to PFAS retardation in the subsurface[J]. Science of the Total Environment, 2018, 613/614: 176 - 185.
- [5] LYU Ying, BRUSSEAU M L, CHEN Wei, et al. Adsorption of PFOA at the air-water interface during transport in unsaturated porous media[J]. Environmental Science & Technology, 2018, 52(14): 7745 – 7753.
- [6] BRUSSEAU M L. Estimating the relative magnitudes of adsorption to solid-water and air/oil-water interfaces for per- and poly-fluoroalkyl substances[J]. Environmental Pollution, 2019, 254, Part B: 113102.
- [7] COSTANZA J, ARSHADI M, ABRIOLA L M, et al. Accumulation of PFOA and PFOS at the air-water interface[J]. Environmental Science & Technology Letters, 2019, 6(8): 487 – 491.
- [8] GUO Bo, ZENG Jicai, BRUSSEAU M L. A mathematical model for the release, transport, and retention of per-and polyfluoroalkyl substances (PFAS) in the vadose zone[J]. Water Resources Research, 2020, 56(2): e2019WR026667.
- [9] WANG Zhanyuan, DEWITT J, HIGGINS C P, et al. Correction to "a never-ending story of per- and polyfluoroalkyl substances (PFASs)?"[J]. Environmental Science & Technology, 2018, 52(5): 3325.
- [10] HUNTER ANDERSON R, ADAMSON D T, STROO H F. Partitioning of poly- and perfluoroalkyl substances from soil to groundwater within aqueous film-forming foam source zones[J]. Journal of Contaminant Hydrology, 2019, 220: 59 - 65.
- [11] DAUCHY X, BOITEUX V, COLIN A, et al. Deep seepage of per- and polyfluoroalkyl substances through the soil of a firefighter training site and subsequent groundwater contamination [J]. Chemosphere, 2019, 214: 729 – 737.
- [12] FILIPOVIC M, WOLDEGIORGIS A, NORSTRÖM K, et al. Historical usage of aqueous film forming foam: A case study of the widespread distribution of perfluoroalkyl acids from a military airport to groundwater, lakes, soils and fish[J]. Chemosphere, 2015, 129: 39 – 45.

- [13] HOISAETER A, PFAFF A, BREEDVELD G D. Leaching and transport of PFAS from aqueous film-forming foam (AFFF) in the unsaturated soil at a firefighting training facility under cold climatic conditions[J]. Journal of Contaminant Hydrology, 2019, 222; 112 – 122.
- XIAO Feng, SIMCIK M F, HALBACH T R, et al. Perfluorooctane sulfonate (PFOS) and perfluorooctanoate (PFOA) in soils and groundwater of a U S metropolitan area: Migration and implications for human exposure[J]. Water Research, 2015, 72: 64 – 74.
- [15] WEBER A K, BARBER L B, LEBLANC D R, et al. Geochemical and hydrologic factors controlling subsurface transport of poly- and perfluoroalkyl substances, cape cod, massachusetts[J]. Environmental Science & Technology, 2017, 51(8): 4269 – 4279.
- [16] 潘明浩,时健,左锐,等.水位波动下包气带透镜体影响LNAPL迁移的数值模拟研究[J].水文地质工程地质,2022,49(1):154-163.[PAN Minghao, SHI Jian,ZUO Rui, et al. A numerical simulation study of the effect of the vadose zone with lenses on LNAPL migration under the fluctuating water table[J]. Hydrogeology & Engineering Geology, 2022, 49(1): 154 163. (in Chinese with English abstract)]
- [17] BRUSSEAU M L, YAN Ni, VAN GLUBT S, et al. Comprehensive retention model for PFAS transport in subsurface systems[J]. Water Research, 2019, 148: 41 – 50.
- [18] GUO Bo, ZENG Jicai, BRUSSEAU M L, et al. A screening model for quantifying PFAS leaching in the vadose zone and mass discharge to groundwater[J]. Advances in Water Resources, 2022, 160: 104102.
- [19] BRUSSEAU M L, ANDERSON R H, GUO Bo. PFAS concentrations in soils: Background levels versus contaminated sites[J]. The Science of the Total Environment, 2020, 740: 140017.
- [20] BRUSSEAU M L, VAN GLUBT S. The influence of molecular structure on PFAS adsorption at air-water interfaces in electrolyte solutions[J]. Chemosphere, 2021, 281: 130829.
- [21] LYU Ying, BRUSSEAU M L. The influence of solution chemistry on air-water interfacial adsorption and transport of PFOA in unsaturated porous media[J]. The Science of the Total Environment, 2020, 713; 136744.
- [22] BRUSSEAU M L, VAN GLUBT S. The influence of surfactant and solution composition on PFAS adsorption at

fluid-fluid interfaces [J]. Water Research, 2019, 161: 17 – 26.

- [23] EL OUNI A, GUO Bo, ZHONG Hua, et al. Testing the validity of the miscible-displacement interfacial tracer method for measuring air-water interfacial area: Independent benchmarking and mathematical modeling[J]. Chemosphere, 2021, 263: 128193.
- [24] ZENG Jicai, BRUSSEAU M L, GUO Bo. Model validation and analyses of parameter sensitivity and uncertainty for modeling long-term retention and leaching of PFAS in the vadose zone[J]. Journal of Hydrology, 2021, 603: 127172.
- [25] ZENG J, GUO Bo. Reduced accessible air-water interfacial area accelerates PFAS leaching in heterogeneous vadose zones[J]. Geophysical Research Letters, 2023, 50(8): e2022GL102655.
- [26] HITZELBERGER M, KHAN N A, MOHAMED R A M,

et al. PFOS mass flux reduction/mass removal: Impacts of a Lower-permeability sand lens within otherwise homogeneous systems[J]. Environmental Science & Technology, 2022, 56(19): 13675 – 13685.

- ZENG Jicai, GUO Bo. Multidimensional simulation of PFAS transport and leaching in the vadose zone: Impact of surfactant-induced flow and subsurface heterogeneities[J].
 Advances in Water Resources, 2021, 155; 104015.
- [28] 吴佩鹏, 束龙仓, 李福林, 等. 层状非均质性影响下河 流对地下水的补给过程研究 [J]. 水文地质工程地 质, 2023, 50(3): 44 - 53. [WU Peipeng, SHU Longcang, LI Fulin, et al. Influence of stratified heterogeneity on the recharge from surface water to groundwater[J]. Hydrogeology & Engineering Geology, 2023, 50(3): 44 - 53. (in Chinese with English abstract)]

编辑:张若琳



郭芷琳,教育部青年人才,南方科技大学环境科学与工程学院副教授。博士毕业 于美国亚利桑那大学环境科学专业,美国加州大学戴维斯分校水文系博士后。2019 年8月加入南方科技大学。现任生态环境部流域地表水-地下水污染综合防治重点 实验室副主任、中国环境学会生态地质环境专业委员会秘书长、美国地球物理学会 地下水委员会和国际水利与环境学会地下水与管理委员会委员。此外,还担任国际 水文水资源权威期刊 Water Resources Research、Journal of Hydrology、Groundwater 等 期刊副主编。

围绕地下水污染机理与修复,以及全球变化下地下水资源的可持续性进行了十 余年深入研究,在水文水资源和环境领域知名期刊发表论文 50 余篇。目前负责国家 重点研发计划项目课题、国家自然科学基金重点支持项目子课题、国家自然科学基

金面上项目、广东省自然科学基金杰出青年项目等国家、省市级项目。