

Environmental engineering Aplinkos inžinerija

KADMIO, ŠVINO IR VARIO SPECIFIKACIJOS PRIKLAUSOMYBĖ NUO DIRVOŽEMIO pH IR TEMPERATŪROS NAUDOJANT VISUAL MINTEQ

Vaida PALIULIENĖ , Saulius VASAREVIČIUS

Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Vilnius, Lietuva

- gauta 2025 m. gegužės 16 d.
- priimta 2025 m. gegužės 30 d.

Santrauka. Dirvožemio užterštumas sunkiaisiais metalais kelia reikšmingą grėsmę aplinkai ir žmonių sveikatai, ypač dėl metalų toksiškumo bei jų gebėjimo kauptis organizmuose. Šio tyrimo tikslas – nustatyti, kaip dirvožemio pH ir temperatūra veikia kadmio (Cd^{2+}), švino (Pb^{2+}) ir vario (Cu^{2+}) cheminę specifikaciją, mobilumą bei imobilizacijos potencialą. Didėjant pH laisvųjų sunkiųjų metalų koncentracija mažėja dėl kompleksų susidarymo ir nusėdimo, o temperatūros padidėjimas paspartina cheminių reakcijų kinetiką, keisdamas metalų aktyvumą. Naudojant VISUAL MINTEQ modeliavimą, atlikta simuliacija esant skirtingoms pH (4–8) ir temperatūros (15–40 °C) sąlygoms. Rezultatai parodė, kad esant žemesniam pH metalų aktyvumas reikšmingai padidėja, tačiau temperatūros poveikis yra sudėtingas – priklausomai nuo metalo, pastebimos tiek teigiamos, tiek neigiamos tendencijos. Gauti duomenys suteikia pagrindą tolesniems tyrimams, ypač siekiant optimizuoti užterštų dirvožemių imobilizacijos strategijas, nors kai kurios stebimos tendencijos neatitinka prielaidų ir reikalauja papildomos analizės.

Reikšminiai žodžiai: cheminė specifikacija, metalų mobilumas, sunkieji metalai, užterštas dirvožemis, VISUAL MINTEQ.

 Autorius susirašinėti. El. paštas vaida.paliulienė@vilniustech.lt

1. Įvadas

Dirvožemio tarša sunkiaisiais metalais neigiamai veikia gyvų organizmų funkcionavimą (Wang et al., 2022). Al-Jburi ir Al-Kasser (2023) savo darbe rašė, kad pasauliniu mastu dirvožemio užterštumas sunkiaisiais metalais išaugo, o tam įtakos daugiausiai turėjo žmonių antropogeninė veikla. Žemės ūkis, pramoninės veiklos ir kasyba yra pagrindiniai šių metalų taršos šaltiniai (Wu et al., 2025). Analizuojant mokslinės literatūros straipsnius daugiausiai analizuojami varis, švinas ir kadmio, kadangi jie dažniausiai randami antropogeninės veiklos užterštuose dirvožemiuose (Basita et al., 2024; Hu et al., 2024; Karmakar et al., 2024; Kim et al., 2019; Wu et al., 2025). Dirvožemio užterštumas šiais metalais svyruoja: švino – nuo 1,5 iki 663 mg kg⁻¹, vario – nuo 3,6 iki 300 mg kg⁻¹, kadmio – nuo 1,8 iki 32 mg kg⁻¹ (Khalid et al., 2023).

Dirvožemio užterštumo ir rizikos vertinimo požiūriu būtina suprasti dirvožemyje vykstančius ekologinius procesus. Tam tikri dirvožemio procesai turi įtakos sunkiųjų metalų cheminei specifikacijai ir jų biogeocheminiam aktyvumui. Khalid su bendraautoriais (2023) teigimu, nepaisant daugybės tyrimų ir gausių duomenų apie dirvožemio kitus cheminius aspektus, duomenų apie sunkiųjų metalų

cheminę specifikaciją yra palyginti nedaug. Straipsniuose dažniausiai analizuojamas antropogeninės veiklos užterštas dirvožemis sunkiaisiais metalais nustatant bendrą užterštumo lygį ir dirvožemio valymo galimybes (Natasha et al., 2022). Dirvožemio fizinės ir cheminės savybės gali paveikti sunkiuosius metalus. Pavyzdžiui, dirvožemio drėgmė susijusi su mikroorganizmų augimu ir gebėjimu imobilizuoti sunkiuosius metalus (Karmakar et al., 2024). Smėlingame dirvožemyje sunkieji metalai greičiau migruoja ir gali patekti į gruntinius vandenius (Qu et al., 2019). Dirvožemio pH ir temperatūra susijusi su sunkiųjų metalų biologiniu prieinamumu ir mobilumu aplinkoje (Radziemska et al., 2022). Siekiant nustatyti dirvožemio fizinių ir cheminių savybių ryšį su sunkiaisiais metalais galima naudoti kompiuterines modeliavimo programas. Mokslinių darbų autoriai dažniausiai naudoja VISUAL MINTEQ programą (Benzoni, 2021; Cuskeet et al., 2017; Iqbal et al., 2017; Khalid et al., 2023; Kennedy & Zawadi, 2018; Liu et al., 2018; Shi et al., 2020; Zhang et al., 2018; Zhu et al., 2024). Ši programa leidžia atsižvelgti į skirtingas sunkiųjų metalų reakcijas ir sąveikas su dirvožemio komponentais. Įvairūs fiziniai ir cheminiai reiškiniai, aprašantys masės pernešimus gruntuose, yra labai sudėtingi ir sunkiai apdorojami (Zhu et al., 2024). Kad šie reiškiniai būtų labiau suprantami, juos

reikia sumodeliuoti. Todėl tampa būtina ne tik kiekybiškai įvertinti sunkiųjų metalų kiekį, bet ir suprasti jų cheminę specifikaciją bei reakcijas dirvožemyje. Šiame tyrime siekiama išanalizuoti, kaip keičiantis dirvožemio pH ir temperatūrai kinta kadmio, švino ir vario koncentracijos bei aktyvumas. Šio tyrimo problema yra išsiaiškinti, kaip būtent šie parametrai veikia sunkiųjų metalų formų pasiskirstymą ir kodėl pasirinktos konkrečios sąlygos, lyginant su pradinio hipotezės turiniu. Darbo aktualumą lemia praktinis poreikis – naudojant gautus duomenis, planuojami tolesni tyrimai dėl dirvožemio užterštumo sunkiaisiais metalais ir imobilizacijos procesų.

Darbo hipotezė – didėjant pH, mažėja sunkiųjų metalų laisvųjų jonų koncentracija dėl kompleksų susidarymo arba nusėdimo procesų, o temperatūra veikia šiuos procesus skirtingai, priklausomai nuo konkretaus metalo.

2. VISUAL MINTEQ naudojimas moksliniuose tyrimuose

Kompiuterinės programos gali sumodeliuoti metalo specifikaciją, todėl galima išsiaiškinti sunkiojo metalo elgesį ir likimą terpėje. Kai kurie metalo specifikacijų modeliavimo kompiuterinių programų pavyzdžiai yra WHAM, ECOSAT, VS2DTI, FITEQL, PHREEQ ir VISUAL MINTEQ (Kennedy & Zawadi, 2018). Atsižvelgiant į dirvožemio pH pasiskirstymą VISUAL MINTEQ programinė įranga naudojama sunkiųjų metalų pokyčiams analizuoti atsižvelgiant į dirvožemio pH (Zhu et al., 2024). Gustafsson sukurtas VISUAL MINTEQ yra laisvos programinės įrangos cheminės pusiausvyros modelis, kuris gali būti naudojamas metalų specifikacijai,

tirpumo pusiausvyrai, sorbcijai ir toksikologijai apskaičiuoti metalų vandeniniuose šaltiniuose (Khalid et al., 2023). Tai nemokama programinė įranga, o ją naudojant galima apskaičiuoti sunkiųjų metalų pusiausvyros pasiskirstymą pagal skirtingą tirpalo cheminę sudėtį (Shi et al., 2020). Mokslinėje literatūroje, kurioje analizuojama dirvožemio tarša sunkiaisiais metalais, dažniausiai naudojama VISUAL MINTEQ programa, todėl pateikta 1 lentelė, pagrindžianti šį teiginį.

VISUAL MINTEQ yra plačiai naudojama cheminėms specifikacijoms modeliuoti, nes ji leidžia tiksliai numatyti metalų reakcijas įvairiose terpėse. Jos taikymo galimybės suteikia greitą ir patikimą rezultatų analizę, kuri yra ypač vertinga, kai kalbama apie dirvožemio užterštumą sunkiaisiais metalais (1 lentelė).

3. Metodika

Siekiant nustatyti kadmio, vario ir švino cheminę specifikaciją naudota VISUAL MINTEQ kompiuterinė programa. Šiam modeliui reikia tam tikrų dirvožemio savybių kaip įvesties kintamųjų, kad būtų galima nustatyti sunkiųjų metalų specifikaciją. Reikalingos dirvožemio charakteristikos: sunkiojo metalo koncentracija, pH, temperatūra (2 lentelė).

Pasirinkta tokia sunkiųjų metalų koncentracija, kad dirvožemis būtų užterštas vieną kartą daugiau už leistiną Lietuvos normą. Simuliacijos sąlygos (pH ir temperatūros intervalai) buvo parinktos siekiant atspindėti realias dirvožemio pokyčių tendencijas bei numatyti galimą imobilizacijos efektyvumą.

Gautiems duomenims apdoroti naudota *Microsoft Excel* 2019.

1 lentelė. Moksliniuose tyrimuose naudojama VISUAL MINTEQ

Tirti metalai	Tyrimo aprašymas	Mokslinių darbų autoriai
As ⁺³ , Cd ⁺²	Atsižvelgiant į dirvožemio pH buvo naudojama kompiuterinė programa arseno ir kadmio pokyčiams imituoti ir analizuoti dirvožemyje priklausomai nuo pH	Zhu et al. (2024)
Cd ⁺² , Cr ⁺² , Fe ⁺² , Cu ⁺² , Mn ⁺² , Ni ⁺² , Zn ⁺² , Pb ⁺²	Tyrimo buvo analizuota metalų cheminė specifikacija viršutiniuose ir apatiniuose dirvožemio sluoksniuose naudojant šią programą	Khalid et al. (2023)
Ni ⁺² , Cu ⁺² , Zn ⁺² , As ⁺³ ir Pb ⁺²	Cu yra labiausiai oksiduojamas metalas, palyginti su kitais tirtais metalais	Benzoni (2021)
Cr ⁺⁴	Remiantis modelio skaičiavimais, ferihidritas dominavo Cr(VI) jungiantis esant pH 3,0–7,0. Nustatyta, kad ferihidrito ir reaktyviųjų dirvožemio organinių medžiagų kiekis yra pagrindinis veiksnys, turintis įtakos RO–	Shi et al. (2020)
Cu ⁺²	Dirvožemio savybių įtaka Cu skaidymui buvo įvertinta įvairiuose dirvožemiuose taikant daugkartinę regresinę analizę	Zhang et al. (2018)
Cd ⁺² , Pb ⁺² , Cu ⁺²	Modeliavimo programa leido įvertinti metalų jonus ir sulfatus kaip įprastas chemines rūšis filtratuose	Liu et al. (2018)
Cu ⁺² , Pb ⁺² , Co ⁺²	Modelio rezultatai parodė, kad Cu ⁺² , Pb ⁺² ir Co ⁺² jonai klesti vandeniniuose rūgštiniuose tirpaluose iki pH 6,5	Kennedy and Zawadi (2018)
Pb ⁺²	Ši programa prognozavo, kad švino koncentracija buvo didesnė druskos paveiktuose dirvožemiuose	Iqbal et al. (2017)
Cu ⁺² , Zn ⁺² , Pb ⁺²	Pagrindinių komponentų analizė parodė, kad svarbiausi veiksniai, lėmę metalų tirpumą eksperimento metu, buvo pH ir dirvožemio tirpaluose esančios ištirpusios organinės anglies koncentracija	Cuske et al. (2017)

2 lentelė. Parametrai, naudoti VISUAL MINTEQ programoje

	Parametrai
Cu^{+2}	150 mg/l
Pb^{+2}	160 mg/l
Cd^{+2}	3 mg/l
Temperatūra	+15–+40 °C
pH	4–8

4. Sumodeliuoti duomenys VISUAL MINTEQ

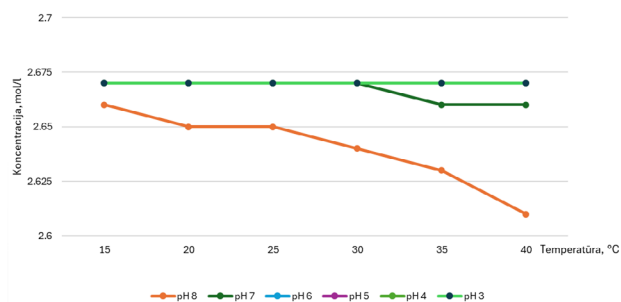
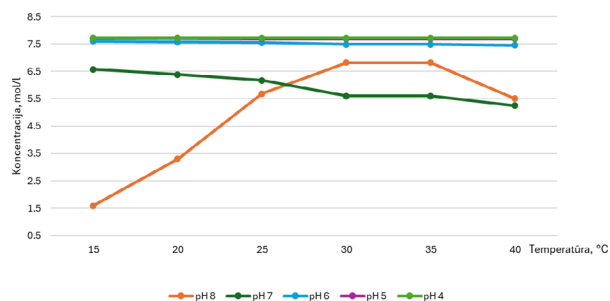
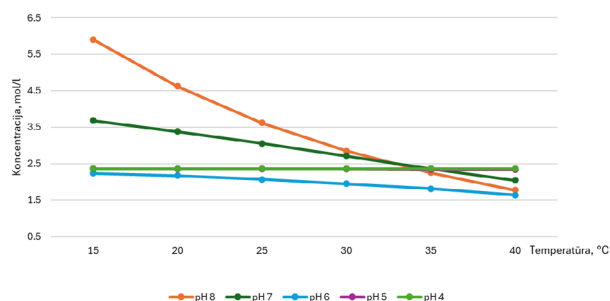
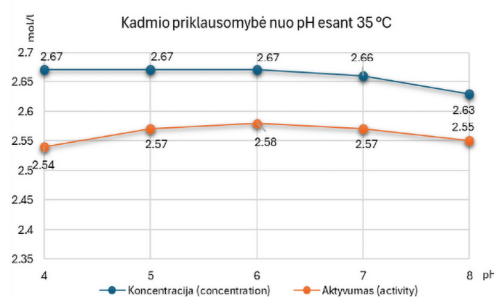
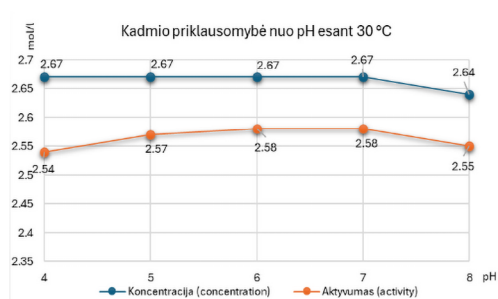
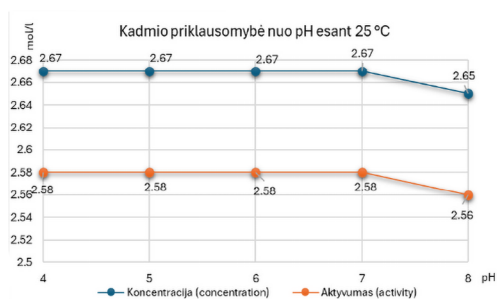
Tyrimo metu išsiaiškinta, kad visų sunkiųjų metalų koncentracijos pokyčiams turi įtakos tiek pH, tiek temperatūra.

Aptariant 1 paveikslą gautus duomenis aišku, kad nuo pH 3 iki pH 6 kadmio koncentracijos duomenys išlieka vienodi nepriklausomai nuo temperatūros. Nežymūs kadmio koncentracijos pokyčiai nustatyti, kai pH 7, o temperatūra 35 °C ir daugiau. pH 8 skirtingai veikia kadmio koncentraciją priklausomai nuo visų temperatūrų.

Analizuojant 2 paveikslą gautus duomenis aišku, kad švino koncentracija yra didžiausia esant pH 4 ir pH 5, nepriklausomai nuo temperatūros. Taip pat Pb^{+2} koncentracija maža esant pH 8 (1,05–1,59 mol/l), kai yra žema temperatūra (15–25 °C).

Aptariant 3 paveikslą gautus duomenis aišku, kad vario koncentracija yra labai maža (1.43–1.11 mol/l) esant žemai temperatūrai (15–20 °C). Cu^{+2} koncentracijos didžiausi pokyčiai yra esant pH 8, kuo žemesnė temperatūra, tuo koncentracija didesnė, o didėjant temperatūrai koncentracija palaipsniui mažėja (40 °C).

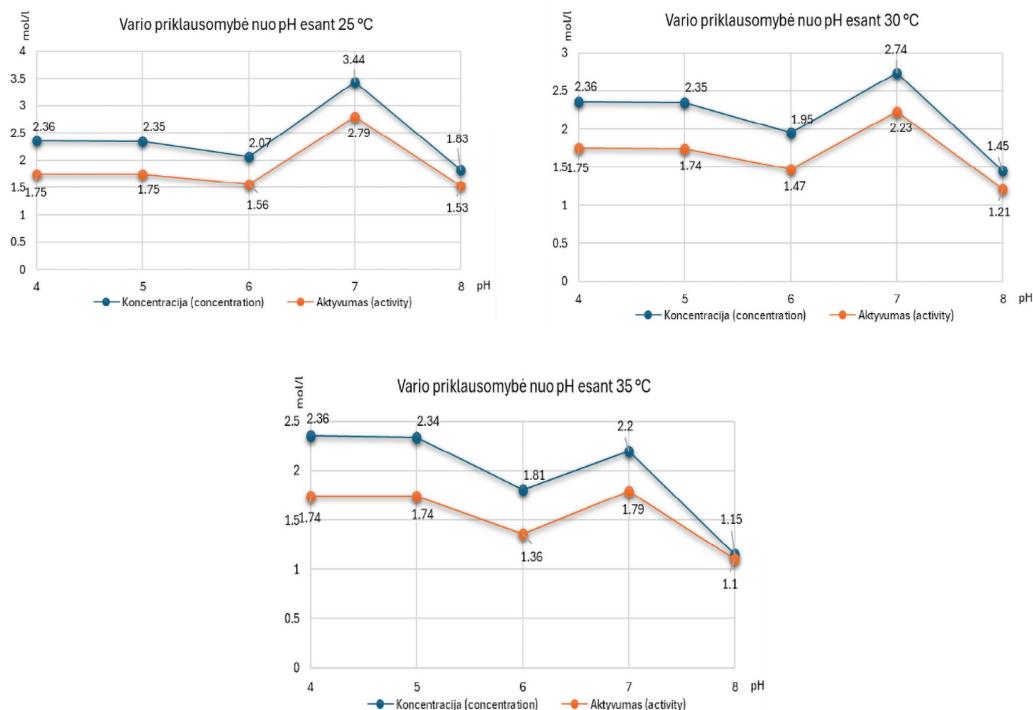
Lyginant 4 paveiksle pateiktą kadmio priklausomybę nuo pH esant 25 °C, 30 °C ir 35 °C aišku, kad šio metalo pastovi koncentracija yra iki pH 7. Esant 35 °C temperatūrai nustatyti pokyčiai, kai dirvožemio pH 8, tuomet kadmio

**1 paveikslas.** Kadmio priklausomybė nuo pH ir temperatūrų**2 paveikslas.** Švino priklausomybė nuo pH ir temperatūrų**3 paveikslas.** Vario priklausomybė nuo pH ir temperatūrų**4 paveikslas.** Kadmio priklausomybė nuo pH skirtingomis temperatūromis

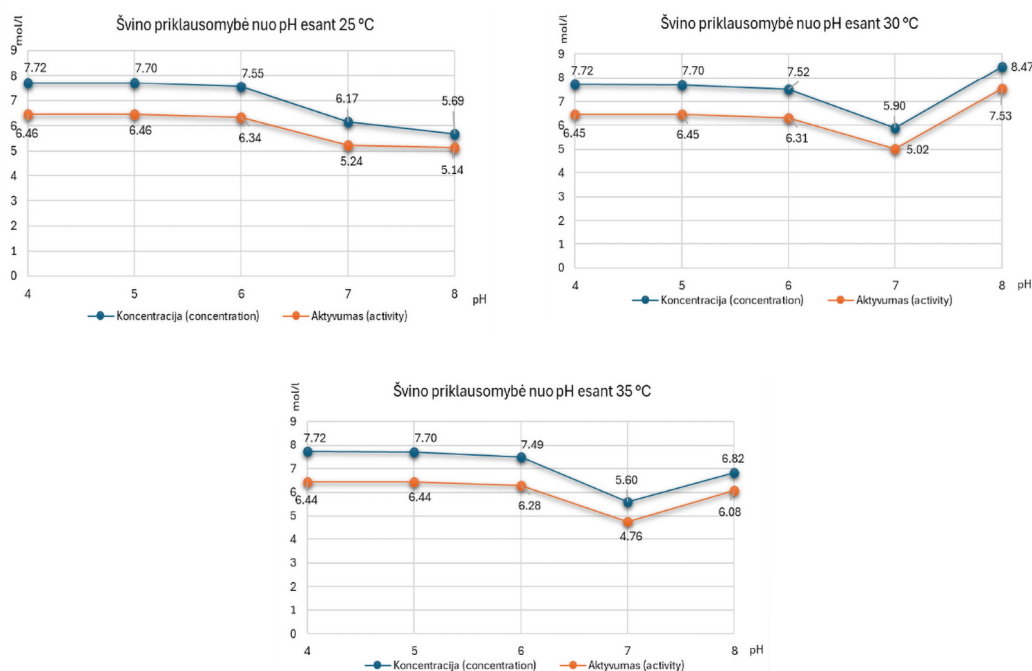
koncentracija išauga. Esant 30 °C temperatūrai Cd^{+2} aktyvumas mažiasias, kai pH 7.

Modeliavimas parodė, kad, esant žemai temperatūrai (15–25 °C) ir pH intervale nuo 3 iki 6, kadmio koncentracija išlieka pastovi, tačiau ties 35 °C koncentracija padidėja. Tai rodo, kad temperatūros padidėjimas lemia cheminės reakcijos pokyčius, kurių metu atsiranda daugiau laisvųjų kadmio jonų, ypač esant šarminėms sąlygoms (pH 8).

Lyginant 5 paveikslą pateiktą vario priklausomybę nuo pH esant 25 °C, 30 °C ir 35 °C aišku, kad šio metalo pastovi koncentracija yra iki pH 5. Esant 25 °C, 30 °C, 35 °C temperatūrai nustatyti pokyčiai, kai dirvožemio pH 7, tuomet vario koncentracija išauga. Esant 25 °C ir 30 °C temperatūrai Cd^{+2} koncentracija didėja, kai pH 9. Mažiausia vario koncentracija esant 25 °C ir 30 °C temperatūrai, kai pH 8.



5 paveikslas. Vario priklausomybė nuo pH skirtingomis temperatūromis



6 paveikslas. Švino priklausomybė nuo pH skirtingomis temperatūromis

Vario atveju modeliavimas atskleidė, kad koncentracijos pokyčiai yra mažesni esant žemesnei temperatūrai (15–20 °C), o didėjant temperatūrai (ypač ties 40 °C) – koncentracija palaipsniui mažėja. Pastebima, kad esant pH 7 ir aukštesnei temperatūrai vario koncentracija gali šiek tiek padidėti, tai rodo kompleksinius reakcijų mechanizmus.

6 paveiksle pateikta švino priklausomybė nuo pH esant 25 °C, 30 °C ir 35 °C temperatūrai. Šio metalo pastovi koncentracija yra iki pH 6. Esant dirvožemio pH 8 švino koncentracija išauga. Mažiausia švino koncentracija ir aktyvumas yra esant pH 7 aukščiausioje temperatūroje.

Švino koncentracija buvo didžiausia esant pH 4–5 nepriklausomai nuo temperatūros, o kai pH 8 – koncentracija itin sumažėjo, ypač esant žemesnėms temperatūroms. Tai rodo, kad švino aktyvumas stipriai priklauso nuo dirvožemio rūgštumo, o šarminėse terpėse gali vykti kompleksų susidarymo procesai, mažinantys jo biologinį prieinamumą.

5. Diskusija

Siekiant nustatyti kadmio, vario ir švino cheminę specifikaciją, tyrime naudota kompiuterinė programa VISUAL MINTEQ. Nustatyta, kad metalų aktyvumas atspindi koncentracijos pokyčius, bet dėl vykstančių sąveikų būna mažesnis nei bendra koncentracija. Karmakar su bendraautoriais (2024) sutinka su teiginiu, kad aktyvumas koreliuoja su metalų koncentracija.

Esant žemai temperatūrai, daugiau vario gali būti nusėdę kaip netirpi fazė ($\text{Cu}(\text{OH})_2$). Ties 25 °C įvyksta fazių pusiausvyros pasikeitimas, galimai dalis vario ištirpsta kaip kompleksai. Aukštesnėje temperatūroje (30 °C ir daugiau) pradeda vyrauti netirpios vario formos, todėl Cu^{+2} koncentracija tirpale mažėja (Zhang et al., 2018).

Esant didesniai pH ir aukštesnei temperatūrai, kadmio aktyvumas didėja, tačiau esant 25 °C temperatūrai – mažėja. Mažesnis pH sumažina metalų adsorbciją prie dirvožemio mineralinių ir organinių dalių, todėl daugiau kadmio lieka ištirpusių formų, kurias lengviau įsisavina augalai. Aukštesnė temperatūra gali paspartinti cheminių reakcijų kinetiką, įskaitant adsorbciją bei desorbciją, o tai dar labiau padidina kadmio mobilumą dirvožemyje (Karmakar et al., 2024).

Švino aktyvumas didžiausias 25 °C temperatūroje, kai pH siekė 8. Esant rūgštinėms terpėms švino tirpumas ir judrumas didėja, todėl jis tampa labiau mobilus ir lengviau pasiekiamas augalams. Khalid su bendraautoriais (2023) teigimu, neutralioje ar šarminėje terpėje švinas dažniausiai būna hidroksidų ar karbonatų formų, tai sumažina jo biologinį prieinamumą.

Shi su bendraautoriais (2020) bei Liu su bendraautoriais (2018) teigimu, pH turi įtakos sunkiųjų metalų aktyvumui. Esant žemesniai pH, metalų jonų aktyvumas išauga dėl sumažėjusios adsorbcijos. Tai reiškia, kad didesnis metalų biologinis prieinamumas gali padidinti toksiškumo riziką. Temperatūros didėjimas paspartina cheminių reakcijų kinetiką, tačiau poveikis nėra vienareikšmis – kai kurių metalų atveju matomi tiek aktyvumo padidėjimai, tiek sumažėjimai. Šios tendencijos gali būti susijusios su fazių

pasikeitimais bei kompleksų formavimusi, todėl būtina tolesnė analizė, kad būtų galima išsamiau suprasti šiuos procesus.

Šiuo tyrimu nustatyta, kad VISUAL MINTEQ yra tinkamas modeliavimui, leidžiantis prognozuoti skirtingų sunkiųjų metalų cheminę elgesį realiomis dirvožemio sąlygomis. Svarbu pabrėžti, kad pasirinkti tyrimo parametrai (pH 4–8 ir temperatūra 15–40 °C) buvo nustatyti ne tik siekiant išanalizuoti esamą situaciją, bet ir tam, kad gauti duomenys galėtų būti pritaikyti tolesniems eksperimentams, susijusiems su dirvožemio užterštumo sunkiaisiais metalais imobilizacija.

Gauti rezultatai iš dalies atitiko hipotezę (pvz., didėjant pH laisvųjų metalų koncentracija mažėja), tačiau kai kuriuose temperatūros diapazonuose atsirado netikėtų tendencijų, kurios rodo, kad procesai yra sudėtingesni ir reikalauja papildomo tyrimo. Šio darbo rezultatai gali būti tiesiogiai taikomi praktikoje, planuojant užterštų teritorijų valymą ir rizikos mažinimo priemones.

6. Išvados

VISUAL MINTEQ modelis yra veiksmingas įrankis, padedantis prognozuoti sunkiųjų metalų cheminę specifikaciją skirtingomis dirvožemio sąlygomis.

Tyrimu nustatyta, kad, esant žemai pH (4–6), kadmio, švino ir vario aktyvumas yra didžiausias, o tai gali didinti šių metalų toksiškumą aplinkoje. Padidėjus pH nuo 7 iki 8, sumažėjo vario ir kadmio aktyvumas.

Temperatūros poveikis skyrėsi tarp tiriamų metalų: kadmio aktyvumas padidėjo esant +35 °C, vario aktyvumas sumažėjo, o švino aktyvumas buvo sąlygotas pH ir temperatūros sąveikos.

Tyrimo rezultatai rodo, kad reguliuojant dirvožemio pH ir atsižvelgiant į temperatūrą galima valdyti sunkiųjų metalų prieinamumą, o tai yra svarbu planuojant imobilizacijos procesą.

Literatūra

- Al-Jbury, M. M. S., & Al-Kasser, M. K. (2023). Evaluation heavy metals pollution in the soil from some regions of Al-Diwaniyah City / Iraq. *Earth and Environmental Science*, 1259, Article 012013. <https://doi.org/10.1088/1755-1315/1259/1/012013>
- Basita, A., Andleeb, S., Liaqat, I., Ashraf, N., Ali, S., Naseer, A., Nazir, A., & Kiyani, F. (2024). Characterization of heavy metal-associated bacteria from petroleum-contaminated soil and their resistogram and antibiogram analysis. *Folia Microbiologica*, 69, 975–991. <https://doi.org/10.1007/s12223-024-01135-6>
- Benzoni, Y. (2021). *Heavy metals mobility in soils: Comparison of soil samples before and after an oxidation treatment*. <https://www.politesi.polimi.it/handle/10589/195962>
- Cuske, M., Karczewska, A., & Gałka, B. (2017). Speciation of Cu, Zn, and Pb in soil solutions extracted from strongly polluted soils treated with organic materials. *Polish Journal of Environmental Studies*, 26(2), 567–575. <https://doi.org/10.15244/pjoes/66710>
- Hu, X., Yu, C., Shi, J., He, B., Wang, X., & Ma, Z. (2024). Biomineralization mechanism and remediation of Cu, Pb and Zn by

- indigenous ureolytic bacteria *B. intermedia* TSBOI. *Journal of Cleaner Production*, 436, Article 140508. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2023.140508>
- Iqbal, M. M., Murtaza, G., Naz, T., Akhtar, J., Afzal, M., Meers, E., & Laing, G. D. (2017). Amendments affect lead mobility and modulated chemo-speciation under different moisture regimes in normal and salt-affected lead-contaminated soils. *International Journal of Environmental Science and Technology*, 14, 113–122. <https://doi.org/10.1007/s13762-016-1126-9>
- Karmakar, D., Magotra, S., Negi, R., Kumar, S., Rustagi, S., Singh, S., Rai, A. H., Kour, D., & Yadav, A. N. (2024). *Bacillus* species for sustainable management of heavy metals in soil: Current research and future challenges. *Journal of Applied Biology & Biotechnology*, 12(2), 22–35. <https://doi.org/10.7324/JABB.2024.157765>
- Khalid, S., Sahid, M., Alothman, Z. A., Al-Kahtani, A., Muztaza, B., & Dumat, C. (2023). Predicting chemical speciation of metals in soil using Visual Minteq. *Soil Ecology Letters*, 5(3), Article 220162. <https://doi.org/10.1007/s42832-022-0162-2>
- Kim, J. J., Kim, Y. S., & Kumar, V. (2019). Heavy metal toxicity: An update of chelating therapeutic strategies. *Journal of Trace Elements in Medicine and Biology*, 54, 226–231. <https://doi.org/10.1016/j.jtemb.2019.05.003>
- Kennedy, K. K., & Zawadi, K. M. (2018). Towards the use of software modelling for determination of heavy metal speciation in soils in Zambia. *Open Access Library Journal*, 5(7). <https://doi.org/10.4236/oalib.1104706>
- Liu, T., Li, F., Jin, Z., & Yang, Y. (2018). Acidic leaching of potentially toxic metals cadmium, cobalt, chromium, copper, nickel, lead, and zinc from two Zn smelting slag materials incubated in an acidic soil. *Environmental Pollution*, 238, 359–368. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2018.03.022>
- Natasha, S., Shahid, M., Khalid, S., & Saleem, M. (2022). Unrevealing arsenic and lead toxicity and antioxidant response in spinach: A human health perspective. *Environmental Geochemistry and Health*, 44, 487–496. <https://doi.org/10.1007/s10653-021-00818-0>
- Radziemska, M., Gusiati, M. Z., Cydzik-Kwiatkowska, A., Majewski, G., Blazejczyk, A., & Britnick, M. (2022). New approach strategy for heavy metals immobilization and microbiome structure long-term industrially contaminated soils. *Chemosphere*, 308, Article 136332. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2022.136332>
- Shi, Z., Peng, S., Lin, X., Liang, Y., Lee, S. Z., & Allen H. E. (2020). Predicting Cr(VI) adsorption on soils: The role of the competition of soil organic matter. *Environmental Science: Processes & Impacts*, 22, 95–104. <https://doi.org/10.1039/C9EM00477G>
- Zhang, X., Li, J., Wei, D., Li, B., & Ma, Y. (2018). The solid-solution distribution of copper added to soils: Influencing factors and models. *Journal of Soils and Sediments*, 18, 2960–2969. <https://doi.org/10.1007/s11368-018-1962-y>
- Zhu, Z., Liu, H., Yang, Y., Zhou, X., Tang, S., Zhang, S., Zhang, L., Zhu, Y., & Fan, Y. (2024). Remediation characteristics and effects of electrokinetic-citric acid system on karst soil contaminated by arsenic and cadmium. *Environmental Technology & Innovation*, 33, Article 103483. <https://doi.org/10.1016/j.eti.2023.103483>
- Wang, Y., Li, Y., Geng, H., Zuo, Q., Thunders, M., & Qiu, J. (2022). Effect of arsenite on the proteome of earthworms *Eisenia fetida*. *Soil Ecology Letters*, 5, 181–194. <https://doi.org/10.1007/s42832-021-0126-y>
- Wu, Y., Wang, S., Xu, J., Zang, F., Ilga, D., Wu, Y., Wangas, Y., & Nan, Z. (2025). Simultaneous immobilization of multiple heavy metal(loid)s in contaminated water and alkaline soil inoculated Fe/Mn oxidizing bacterium. *Journal of Environmental Sciences*, 147, 370–381. <https://doi.org/10.1016/j.jes.2023.11.010>
- Qu, C., Qian, S., Chen, L., Guan, Y., Zheng, L., Liu, S., Chen, W., Cai, P., & Huang, Q. (2019). Size-dependent bacterial toxicity of hematite particles. *Environmental Science & Technology*, 53, 8147–8156. <https://doi.org/10.1021/acs.est.9b00856>

DEPENDENCE OF CADMIUM, LEAD, AND COPPER SPECIATION ON SOIL pH AND TEMPERATURE USING VISUAL MINTEQ

V. Paliulienė, S. Vasarevičius

Abstract

Soil contamination by heavy metals poses a significant threat to the environment and human health, primarily due to the toxicity of these metals and their ability to accumulate in organisms. To determine how soil pH and temperature affect the chemical speciation, mobility, and immobilization potential of cadmium (Cd^{2+}), lead (Pb^{2+}), and copper (Cu^{2+}). The main hypothesis posits that as pH increases, the concentration of free heavy metals decreases due to the formation of complexes and precipitation, whereas an increase in temperature accelerates the kinetics of chemical reactions, thereby altering metal activity. Using the Visual MINTEQ modeling tool, simulations were carried out under various pH (4–8) and temperature (15–40 °C) conditions. The results showed that at lower pH, metal activity significantly increases; however, the influence of temperature is more complex—both positive and negative trends were observed depending on the metal. These findings provide a foundation for further research, particularly for optimizing strategies to immobilize contaminated soils. Nonetheless, certain observed trends diverged from initial assumptions and called for additional investigation.

Keywords: chemical speciation, metal mobility, heavy metals, contaminated soil, Visual MINTEQ.