

Supporting Information

PCB Emissions from Paint Colorants

Jacob C. Jahnke and Keri C. Hornbuckle*

Department of Civil & Environmental Engineering, IIHR-Hydroscience and Engineering, The University of Iowa, Iowa City, IA, USA. * Phone (319) 335-5148; FAX: (319) 335-566; e-mail: keri-hornbuckle@uiowa.edu

Data generated in this research are available at <https://doi.org/10.25820/vtd8-n771>.¹

Contents

Instrument Parameters.....	2
Quality Assurance and Quality Control Data.....	2
Results.....	4
Modeling.....	24

Instrument Parameters

The samples were analyzed by gas chromatography with tandem mass spectrometry (Agilent 7890A GC system, Agilent 7000 Triple Quad, Agilent 7693 autosampler) using a modified EPA method 1668a. The GC had a Supelco SPB-Octyl capillary column (5% phenyl methyl siloxane, 30 m × 0.25 mm ID, 0.25 µm film thicknesses) installed and utilized helium as the carrier gas (0.8 mL/min) and nitrogen/ argon as the collision gas. The GC was run in solvent vent injection mode (initial temperature 45 °C, initial time 0.06 min, ramp 600 °C/min to inlet temperature 325 °C at 4.4 psi). The oven temperature program was 45 °C for 2.56 min, 45 to 75 °C at 100 °C/min and hold for 5 min, 75 to 150 °C at 15 °C/min and hold for 1 min, 150 to 280 at 2.5 °C/min and final hold 5 min. The triple quadrupole MS electron ionization source was set to 260 °C.

QAQC

We assessed the performance and uncertainty of our measurements using positive and negative controls. In addition to surrogate standard additions and replicate sampling, we also examined the accumulation of PCBs on the PUF-PES placed over clean aluminum foil and foil that had been painted with colorant VV; we measured the congeners remaining on foil at the end of the emission experiments; and we measured emissions aluminum foil spiked with a known mass of PCBs. The congeners captured on PUF-PES placed over unpainted pieces of foil did not follow the trends of increased PCBs that was seen by the painted foil and were therefore used to calculate the study limit of quantification (LOQ) for each congener mass reported.

Table 1: Sample lengths and time steps for Colorant DD. Blanks are a piece of foil that is unpainted. Foil with VV is used as a negative control.

Time (d)	Samples	Blanks	\sum PCBs on Blanks (ng)
1	3	1 foil	1.54
7	3	1 foil	1.39
14	3	1 foil	1.52
21	3	1 foil	1.65
28	3	1 foil	2.00
35	3	1 foil	1.80
42	3	1 foil, 1 foil with VV	1.93, 1.82

Table 2: Sample lengths/ time steps Colorant D. Blanks are a piece of foil that is unpainted. Foil with VV is used as a negative control.

Time (d)	Samples	Blanks	\sum PCBs on Blanks (ng)
1	3	1 foil	7.73
4	3	1 foil	7.69
7	3	1 foil	7.41
14	3	1 foil	27.6
21	3	1 foil	8.97
35	3	1 foil, 1 foil with VV	7.80, 8.62

Table 3: Limit of Quantification (LOQ) values for each PCB congener in pg. The LOQ is calculated using the mass of each congener detected in the PUF-PES placed over unpainted foil (n = 17). LOQ = Average + 2*Standard Deviation for each congener.

Congener	LOQ	Congener	LOQ	Congener	LOQ
1	140.66	68	117.44	144	4.98
2	137.59	72	5.19	145	15.33
3	19.87	73	42.85	146	13.13
4	56.05	77	107.13	147/149	155.58
5	12.24	78	23.86	148	53.91
6	35.53	79	1.92	150	62.95
7	13.13	80	6.26	152	13.96
8	144.04	81	114.46	153/168	94.84
9	16.28	82	125.99	154	58.11
10	8.70	83	23.22	155	41.84
11	418.05	84	239.02	156/157	0.00
12/13	0.00	85/116	229.31	158	10.46
15	86.90	86/97/109/119	195.77	159	0.00
16	269.02	88	3.46	160	1.11
17	291.24	89	27.74	161	10.72
18/30	798.81	90/101/113	487.89	162	0.00
19	84.61	91	104.82	164	8.61
20/28	1061.52	92	98.21	165	1.14
21/33	588.12	93/100	13.11	167	0.00
22	349.89	94	3.11	169	0.00
23	5.07	95	478.99	170	22.64
24	32.01	96	12.29	171/173	15.10
25	41.32	87/125	237.84	172	10.37
26/29	125.83	98	4.21	174	20.42
27	36.45	99	266.71	175	3.42
31	1252.31	102	40.16	176	4.23
32	229.33	103	5.77	177	16.47
34	7.40	104	3.15	178	1.11

35	1.04	105	278.17	179	6.20
36	1.82	106	2.97	180/193	39.33
37	204.53	107	25.92	181	473.73
38	0.92	108/124	20.38	182	1290.35
39	2.09	110	1779.82	183	12.28
40/71	666.05	111	3.79	184	1637.15
41	178.68	112	7.36	185	5.24
42	380.93	114	2748.72	186	179.90
43	50.58	115	2507.85	187	24.09
44/47/65	1388.45	117	2751.99	188	1154.44
45	302.45	118	433.27	189	6.33
46	123.70	120	0.67	190	19.28
48	326.62	121	1.25	191	9.01
49/69	824.05	122	9.60	192	5.23
50/53	283.48	123	18.53	194	24.43
51	83.26	126	0.00	195	9.47
52	1525.78	127	1.74	196	7.45
54	8.23	130	4.18	197	0.00
55	107.29	131	4.45	198/199	17.47
56	641.62	132	42.91	200	0.00
57	4.12	133	2.41	201	4.77
58	3.67	134	7.94	202	32.67
59/62/75	195.82	135/151	25.90	203	6.47
60	499.59	136	18.80	205	8.67
61/70/74/76	1836.73	137	80.66	206	17.58
63	201.97	139/140	126.46	207	14.33
64	799.08	141	17.04	208	7.58
66	1360.10	142	4.50	209	102.98
67	22.66	143	17.48		

Results

Table 4: Average concentration of all congeners measured in the colorants above LOQ (pg g⁻¹ colorant)

Congener	Colorant							
	AXX	D	E	T	REE	ORF	AGF	DD
1	70.4	309.9	--	134.4	--	--	--	2649.6
2	22.0	184.5	--	--	--	--	--	2873.8
3	46.2	143.0	16.7	48.6	631.6	2730.3	--	1507.8
4	2759.2	814.4	38.2	1733.1	49.4	50.9	--	--
5	37.2	34.0	46.5	13.6	--	26.9	2.8	56.6
6	2049.9	4283.5	--	209.3	75.7	35.4	--	69.6

7	17.5	--	--	10.0	--	--	--	--	11.4
8	5170.9	1741.1	--	321.0	1646.6	314.5	--	--	201.5
9	32.4	11.7	18.9	13.6	12.1	--	--	--	20.6
10	49.6	3.6	11.9	26.7	--	--	--	--	--
11	67.2	1248.8	--	331.6	--	956.0	--	--	--
12/13	206.6	1338.8	40.1	20.1	4662.9	323.4	--	--	12.2
15	50.4	327.7	--	--	3584.7	490.4	--	--	--
16	--	--	--	--	--	--	--	--	--
17	329.2	--	--	--	--	--	--	--	--
18/30	--	--	--	--	--	--	--	--	--
19	--	--	--	--	--	--	--	--	--
20/28	--	--	--	--	--	--	--	--	--
21/33	--	--	--	--	--	--	--	--	--
22	--	--	--	--	--	--	--	--	--
23	2.9	12.3	--	5.3	--	--	--	--	--
24	7.5	--	--	--	--	--	--	--	--
25	72.5	32.9	--	--	29.7	--	--	--	--
26/29	25.6	113.8	207.0	--	--	--	--	--	--
27	11.2	--	--	--	--	--	--	--	--
31	--	--	--	--	936.4	--	--	--	--
32	--	--	--	--	--	--	--	--	--
34	8.7	--	--	1.2	--	--	--	--	--
35	9.1	13.8	--	11.2	--	101.8	--	--	9.4
36	2.0	--	--	3.6	0.7	0.3	35.9	--	--
37	--	--	--	--	--	--	--	--	--
38	--	7.4	--	12.4	9.7	12.8	5.0	--	--
39	--	--	--	--	15.4	--	--	--	--
40/71	--	--	--	--	--	--	--	--	--
41	--	--	--	--	--	--	--	--	--
42	--	--	--	--	--	--	--	--	--
43	--	--	--	--	--	--	--	--	--
44/47/65	--	--	--	--	--	--	--	--	--
45	--	--	--	--	--	--	--	--	--
46	--	--	--	--	--	--	--	--	--
48	--	--	--	--	--	--	--	--	--
49/69	--	--	--	--	--	--	--	--	--
50/53	112.3	--	--	--	--	--	--	--	--
51	--	--	--	--	--	--	--	--	--
52	--	--	--	--	--	--	2428.4	--	--
54	5.7	--	--	2.6	--	--	--	--	--
55	--	--	--	--	--	--	--	--	--
56	--	--	--	--	--	--	--	--	--
57	1.5	7.9	--	--	--	--	--	--	--

58	--	--	--	1.1	--	--	--	--
59/62/75	--	--	--	--	--	--	--	--
60	--	--	--	--	--	--	--	--
61/70/74/76	--	--	--	--	--	--	--	--
63	--	--	--	--	--	--	--	--
64	--	--	--	--	--	--	--	--
66	--	--	--	--	--	--	--	--
67	--	37.1	--	--	--	--	--	3.8
68	--	--	--	--	--	--	--	--
72	13.8	--	--	--	--	--	--	--
73	--	--	--	--	--	--	--	--
77	--	--	--	--	--	--	--	--
78	--	--	--	--	--	--	--	--
79	0.7	0.6	--	1.2	0.3	--	0.5	1.9
80	--	--	--	--	--	--	--	--
81	--	--	--	--	--	--	--	--
82	--	--	--	--	--	--	--	--
83	8.6	--	--	6.9	--	--	--	--
84	--	--	--	--	--	--	--	--
85/116	--	--	--	--	--	--	--	--
86/97/109/119	--	--	--	--	--	--	--	--
88	--	8.0	--	0.7	--	--	--	--
89	--	--	--	--	--	--	--	--
90/101/113	--	--	--	--	--	--	1259.7	--
91	--	--	--	--	--	--	--	--
92	--	--	--	--	--	--	91.3	--
93/100	--	--	--	--	--	--	--	--
94	2.9	--	--	--	--	--	--	--
95	--	--	--	--	--	--	--	--
96	--	--	--	--	--	--	--	--
87/125	--	--	--	--	--	--	--	--
98	2.7	--	--	--	--	--	--	--
99	--	--	--	--	--	--	--	--
102	--	--	--	--	--	--	--	--
103	6.1	--	--	--	--	--	--	--
104	1.7	--	--	2.3	--	--	--	--
105	--	--	--	--	--	--	--	--
106	--	52.2	--	0.8	--	--	--	--
107	--	--	--	--	--	--	--	11.6
108/124	--	--	--	--	--	--	--	--
110	--	--	--	--	--	--	--	--
111	--	0.9	--	--	--	--	--	1.9
112	--	3.4	--	--	--	--	--	--

114	--	--	--	--	--	--	--	--
115	--	--	--	--	--	--	--	--
117	--	--	--	--	--	--	--	--
118	--	--	--	--	--	--	--	90.5
120	1.8	--	--	0.5	--	--	0.3	--
121	0.2	--	--	0.2	--	0.3	--	0.2
122	--	--	--	--	--	--	--	--
123	--	--	--	--	--	--	--	--
126	--	--	--	--	--	--	--	--
127	--	--	--	0.6	--	0.3	0.3	--
130	--	60.2	--	--	--	--	--	--
131	--	--	--	1.0	--	--	--	--
132	--	65.5	--	--	--	--	--	--
133	0.4	33.8	1.6	--	--	--	--	0.3
134	--	7.6	--	--	--	--	--	--
135/151	--	115.8	--	--	--	--	--	--
136	--	20.7	--	--	--	--	--	--
137	--	--	--	--	--	--	--	--
139/140	--	--	--	--	--	--	--	--
141	6.9	24.7	--	--	--	--	--	--
142	--	159.8	2.5	--	--	--	--	--
143	--	--	--	--	--	--	--	--
144	--	5.3	--	--	--	--	--	--
145	--	--	--	--	--	--	--	--
146	--	131.3	--	--	13.8	--	--	1295.2
147/149	--	176.0	--	--	--	--	--	668.8
148	8.6	--	--	--	--	--	--	--
150	--	--	--	--	--	--	--	--
152	--	--	--	--	--	--	--	--
153/168	--	214.0	--	--	--	--	--	256.3
154	--	--	--	--	--	--	--	--
155	--	--	--	--	--	--	--	--
156/157	--	17.8	--	--	--	--	--	--
158	--	10.8	--	--	--	--	--	--
159	--	--	--	--	--	--	--	--
160	0.5	125.7	--	--	--	0.2	--	0.3
161	--	--	--	--	--	--	--	--
162	--	6.0	--	--	--	--	--	--
164	--	25.2	--	1.6	--	--	--	--
165	--	2.0	--	0.9	--	--	0.2	--
167	--	15.1	--	--	--	--	--	--
169	--	--	--	--	--	--	--	--
170	--	131.7	--	--	--	--	--	--

171/173	--	34.5	--	--	--	--	--	--	--
172	--	110.9	--	--	--	--	--	--	--
174	--	130.4	--	--	--	--	--	--	--
175	--	23.0	3.4	0.9	0.6	--	--	--	--
176	--	20.4	--	1.0	--	--	--	--	--
177	--	122.3	--	--	--	--	--	--	--
178	--	116.6	--	--	--	--	--	--	0.2
179	--	58.5	--	--	--	--	--	--	--
180/193	9.0	443.5	--	--	--	--	--	--	--
181	227.4	--	--	--	--	--	--	--	--
182	563.3	--	--	--	--	--	--	--	--
183	2.8	101.9	--	2.5	--	--	--	--	--
184	660.7	--	--	--	--	--	--	--	--
185	--	11.9	--	--	0.9	--	--	--	--
186	68.9	--	--	--	--	--	--	--	--
187	--	342.4	--	--	--	--	--	--	78.7
188	363.7	--	--	--	--	--	--	--	--
189	--	28.3	--	--	--	--	--	--	--
190	--	25.2	--	--	--	--	--	--	--
191	--	14.7	--	--	--	--	--	--	--
192	--	2.3	--	--	--	--	--	--	--
194	--	394.6	--	4.9	--	--	--	--	--
195	--	70.4	--	1.8	--	--	--	--	--
196	--	201.2	--	--	--	--	--	--	--
197	--	82.2	--	--	--	--	--	--	--
198/199	--	997.5	--	--	--	--	--	--	--
200	--	51.5	--	--	--	--	--	--	--
201	--	147.2	--	--	--	--	--	--	--
202	--	376.6	--	--	--	--	--	--	--
203	--	329.1	--	1.6	--	--	--	--	--
205	--	59.9	--	--	--	--	--	--	--
206	12.0	4788.9	28.1	--	--	--	--	--	--
207	--	1944.1	--	--	--	--	--	--	--
208	6.2	3655.6	--	2.8	--	--	--	--	--
209	213.2	256109.5	274.8	81.5	--	--	--	--	--

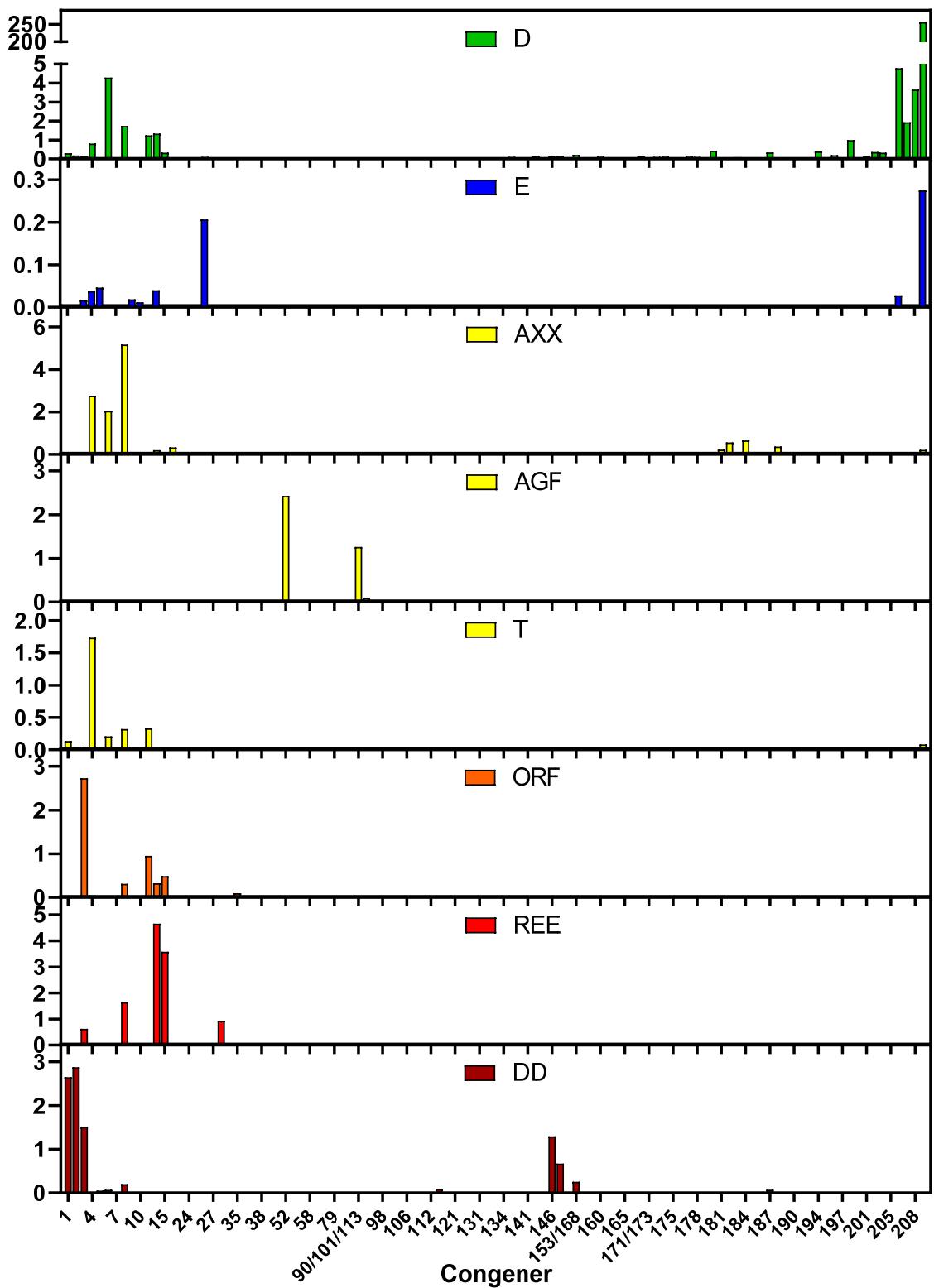


Figure 1. PCB congeners found above LOQ in colorants. The color of the bar indicates the color we observed when extracting each colorant. AXX, T, and AGF are all yellow.

Table 5: Average mass (pg) of PCBs emitted from colorant DD at each time step.

Congener	Time (d)						
	1	7	14	21	28	35	42
1	4002.6	5091.9	5135.0	5109.4	5033.7	6319.0	6078.2
2	2280.6	3944.9	3961.2	4301.6	4258.7	4764.9	4925.0
3	1313.4	2293.3	2329.9	2693.6	2742.2	3025.1	3431.3
4	--	--	12.7	17.6	12.7	43.4	48.7
5	20.8	53.5	63.3	65.4	64.5	64.0	72.0
6	28.2	65.2	71.1	74.0	71.3	80.9	87.2
7	--	3.3	7.3	--	--	4.5	7.8
8	31.5	196.8	232.0	238.8	226.6	256.9	284.2
9	14.5	29.9	30.9	32.6	30.5	37.2	41.5
10	--	2.0	--	2.0	4.8	2.2	2.4
11	--	--	--	--	--	--	--
12/13	--	--	--	7.5	20.5	21.2	22.9
15	--	--	--	--	--	--	--
16	--	--	--	--	--	--	--
17	--	--	--	--	--	--	--
18/30	--	--	--	--	--	--	--
19	--	--	--	--	--	--	--
20/28	--	--	--	--	--	--	--
21/33	--	--	--	--	--	--	--
22	--	--	--	--	--	--	--
23	--	--	--	1.3	--	1.7	--
24	--	--	--	--	--	--	--
25	--	--	--	--	--	--	--
26/29	--	--	--	--	--	--	--
27	--	--	--	--	--	--	--
31	--	--	--	--	--	--	--
32	--	--	--	--	--	--	--
34	--	--	--	--	--	3.1	--
35	--	--	3.8	2.0	4.4	4.8	5.6
36	--	--	--	--	--	--	0.5
37	--	--	--	--	--	--	--
38	0.9	0.7	--	--	--	0.5	--
39	21.4	6.4	19.8	2.7	1.7	7.5	3.0
40/71	--	--	--	--	--	--	--
41	--	--	--	--	--	--	--
42	--	--	--	--	--	--	--
43	--	--	--	--	--	--	--
44/47/65	--	--	--	--	--	--	--

45	--	--	--	--	--	--	--
46	--	--	--	--	--	--	--
48	--	--	--	--	--	--	--
49/69	--	--	--	--	--	--	--
50/53	--	--	--	--	--	--	--
51	--	--	--	--	--	--	--
52	--	--	--	--	--	--	--
54	--	--	--	--	--	--	--
55	--	--	--	--	--	--	--
56	--	--	--	--	--	--	--
57	--	--	--	0.7	--	--	--
58	2.1	--	--	0.7	0.6	--	--
59/62/75	--	--	--	--	--	--	--
60	--	--	--	--	--	--	--
61/70/74/76	--	--	--	--	--	--	--
63	--	--	--	--	--	--	--
64	--	--	--	--	--	--	--
66	--	--	--	--	--	--	--
67	--	--	--	--	--	--	--
68	--	--	--	--	--	--	--
72	1.4	--	--	--	--	--	--
73	--	--	--	--	--	--	--
77	--	--	--	--	--	--	--
78	--	--	--	--	--	--	--
79	0.5	0.5	--	0.6	1.2	0.6	0.5
80	--	--	--	--	--	--	--
81	--	--	--	--	--	--	--
82	--	--	--	--	--	--	--
83	--	--	--	--	--	--	--
84	--	--	--	--	--	--	--
85/116	--	--	--	--	--	--	--
86/97/109/119	--	--	--	--	--	--	--
88	1.7	2.0	5.8	6.9	15.8	15.8	15.2
89	--	--	--	--	--	--	--
90/101/113	--	--	--	--	--	--	--
91	--	--	--	--	--	--	--
92	--	--	--	--	--	--	--
93/100	2.6	--	--	--	--	--	--
94	1.3	--	--	--	--	--	--
95	--	--	--	--	--	--	--
96	--	--	--	--	--	--	--
87/125	--	--	--	--	--	--	--
98	3.1	--	1.6	1.1	1.0	--	--

99	--	--	--	--	--	--	--
102	--	--	--	--	--	8.6	--
103	1.1	--	--	--	--	1.3	--
104	0.7	--	--	--	--	--	--
105	--	--	--	--	--	--	--
106	3.1	--	--	--	1.5	0.8	0.6
107	--	--	--	--	--	--	--
108/124	--	--	--	--	--	--	--
110	--	--	--	--	--	--	--
111	0.6	--	--	--	--	--	--
112	--	--	--	--	--	--	--
114	--	--	--	--	--	--	--
115	--	--	--	--	--	--	--
117	--	--	--	--	--	--	--
118	--	--	--	--	--	--	--
120	--	0.2	--	--	0.2	2.2	--
121	1.2	0.2	--	--	--	--	--
122	--	--	--	--	--	1.7	--
123	--	--	--	--	--	--	--
126	--	--	--	--	--	--	--
127	--	--	--	--	1.2	--	1.0
130	--	--	--	--	--	--	--
131	--	--	--	--	--	--	--
132	--	--	--	--	--	--	--
133	--	0.9	--	--	--	--	--
134	1.4	--	--	1.4	--	--	--
135/151	6.1	--	--	--	--	--	--
136	--	--	--	--	--	--	--
137	--	--	--	--	--	--	--
139/140	--	--	--	--	--	--	--
141	--	--	--	--	--	--	--
142	--	--	--	--	1.0	--	1.6
143	--	--	--	--	--	--	--
144	--	--	--	--	--	--	--
145	--	--	--	--	--	--	--
146	4.2	35.5	85.1	122.3	144.4	188.8	222.3
147/149	--	--	98.7	137.0	161.6	197.1	242.9
148	--	--	--	--	--	--	--
150	--	--	--	--	--	--	--
152	2.4	--	--	--	--	--	--
153/168	--	--	--	--	18.2	--	20.3
154	--	--	--	--	--	--	--
155	--	--	--	--	--	--	--

156/157	--	--	--	--	--	--	--
158	--	--	--	--	--	--	--
159	--	--	--	--	--	--	--
160	--	--	--	0.2	0.4	--	--
161	--	--	--	--	1.5	--	--
162	--	--	--	--	--	--	--
164	1.5	--	--	--	--	--	--
165	--	--	--	--	--	0.2	--
167	--	--	--	--	0.6	--	--
169	--	--	--	--	0.3	--	0.2
170	--	--	--	--	--	--	--
171/173	3.9	--	--	2.8	--	--	--
172	--	--	--	--	--	--	--
174	4.7	--	--	--	--	--	--
175	2.9	--	--	--	--	--	--
176	--	--	--	--	--	--	--
177	--	--	--	--	--	2.9	3.3
178	--	--	--	--	--	--	--
179	2.6	--	--	--	--	--	--
180/193	--	--	--	--	--	--	--
181	--	--	--	--	--	--	--
182	--	--	--	--	--	--	--
183	5.5	--	--	2.6	--	--	--
184	--	--	--	--	--	--	--
185	4.8	--	--	1.7	--	--	--
186	--	--	--	--	--	--	--
187	--	--	--	--	--	--	--
188	--	--	--	--	--	--	--
189	--	--	--	1.4	--	--	--
190	--	--	--	--	--	--	--
191	2.5	--	--	--	--	--	--
192	1.6	--	--	--	--	--	--
194	--	--	--	--	--	--	--
195	4.0	--	--	2.2	--	--	--
196	3.9	1.3	--	1.3	--	--	--
197	--	--	--	--	--	--	--
198/199	7.8	--	--	--	--	--	--
200	--	--	--	--	--	--	--
201	--	--	--	--	--	--	--
202	--	--	--	--	--	--	--
203	3.7	--	--	1.9	1.4	--	--
205	5.6	1.5	--	2.3	--	--	--
206	13.6	3.7	--	3.1	4.1	--	--

207	8.2	7.2	3.3	3.6	3.4	--	3.5
208	4.4	--	1.6	2.3	1.9	--	--
209	35.2	--	--	32.6	--	34.7	--

Table 6: Average mass (pg) of PCBs emitted from colorant D at each time step.

Congener	Time (d)					
	1	4	7	14	21	35
1	395.0	592.8	553.1	455.5	314.9	458.2
2	94.8	169.7	190.5	194.9	178.7	203.3
3	67.9	123.2	145.6	141.2	112.2	134.4
4	312.7	564.9	735.2	811.7	610.5	719.3
5	15.7	19.1	33.9	40.9	29.7	29.8
6	795.3	1673.5	2499.1	3354.7	2984.6	3590.8
7	--	--	--	--	3.5	7.2
8	353.5	708.5	1017.4	1369.1	1242.7	1513.9
9	3.6	12.5	12.1	13.0	12.7	16.2
10	2.7	4.0	5.4	5.1	--	--
11	321.8	545.5	599.7	883.5	1125.6	1343.5
12/13	144.9	256.1	378.3	592.5	709.7	909.0
15	42.4	86.6	96.4	147.2	200.3	220.7
16	--	--	--	--	--	--
17	--	--	--	--	--	--
18/30	--	--	--	--	--	--
19	--	--	--	--	--	--
20/28	--	--	--	--	--	--
21/33	--	--	--	--	--	--
22	--	--	--	--	--	--
23	1.9	1.3	3.7	6.8	3.2	13.2
24	--	--	--	--	--	--
25	8.7	--	--	11.7	33.5	39.7
26/29	--	--	--	24.6	76.8	83.3
27	--	--	--	--	--	--
31	--	--	--	--	--	--
32	--	--	--	--	--	--
34	1.3	--	2.6	--	--	1.5
35	--	--	--	--	--	--
36	--	--	--	--	--	--
37	29.5	--	--	36.6	111.3	116.4
38	--	1.7	--	--	--	--
39	5.9	7.1	--	--	--	--
40/71	--	--	--	--	--	--
41	--	--	--	--	--	--

42	--	--	--	--	--	--
43	--	--	--	--	--	13.6
44/47/65	--	--	--	--	--	--
45	--	--	--	--	--	--
46	--	--	--	--	--	--
48	--	--	--	--	--	--
49/69	--	--	--	--	--	--
50/53	--	--	--	--	--	--
51	--	--	--	--	--	--
52	--	--	--	--	--	--
54	3.4	--	--	--	--	--
55	18.7	--	--	--	--	--
56	--	--	--	--	--	--
57	0.9	0.9	--	0.7	--	--
58	--	1.5	--	--	--	--
59/62/75	--	--	--	--	--	--
60	--	--	--	--	--	--
61/70/74/76	--	--	--	--	--	--
63	--	--	--	--	--	--
64	--	--	--	--	--	--
66	--	--	--	--	--	--
67	--	4.1	--	4.4	14.6	15.8
68	--	--	--	--	--	--
72	2.6	1.6	0.8	1.4	1.0	--
73	--	--	--	--	--	--
77	--	--	--	--	--	--
78	--	--	--	--	--	--
79	--	--	--	--	--	--
80	--	--	--	--	--	--
81	--	--	--	--	--	--
82	--	--	--	--	--	--
83	16.5	14.5	5.4	--	15.3	17.2
84	--	--	--	--	--	47.7
85/116	--	--	--	--	--	--
86/97/109/119	--	--	--	--	81.2	129.2
88	4.8	--	2.7	--	1.6	--
89	--	--	--	--	--	--
90/101/113	--	--	--	108.3	348.4	361.4
91	--	--	--	--	20.7	21.8
92	--	--	--	20.0	40.0	70.6
93/100	2.1	--	--	--	--	--
94	1.0	--	--	--	2.6	--
95	--	--	--	--	335.8	350.8

96	--	--	--	--	--	--
87/125	--	--	--	50.2	157.0	52.0
98	2.4	--	--	--	--	--
99	--	--	--	--	56.5	115.5
102	--	--	--	--	7.7	--
103	1.1	--	--	--	1.1	--
104	1.1	--	--	--	--	0.5
105	--	--	--	--	--	--
106	0.9	--	--	0.7	--	--
107	--	--	--	5.6	10.7	17.6
108/124	8.1	--	3.4	--	3.9	4.4
110	--	--	--	--	--	--
111	--	--	--	--	--	--
112	1.6	--	--	--	--	--
114	--	--	--	--	--	--
115	--	--	--	--	--	--
117	--	--	--	--	--	--
118	--	--	--	--	--	--
120	--	--	--	--	--	--
121	2.5	--	0.3	1.6	2.9	3.5
122	--	--	--	--	2.2	--
123	--	--	--	--	--	3.2
126	--	--	--	--	--	--
127	--	--	--	--	--	--
130	--	--	--	--	--	1.5
131	1.2	0.8	--	--	--	--
132	--	8.5	8.4	21.6	35.3	40.6
133	--	--	--	--	--	--
134	2.1	--	--	--	--	3.2
135/151	20.9	26.1	17.1	27.9	39.1	43.1
136	10.8	15.3	4.6	13.6	25.3	29.4
137	--	--	--	--	--	--
139/140	--	--	--	--	--	--
141	--	4.6	3.9	--	8.4	13.2
142	--	--	--	--	--	--
143	--	--	--	--	--	--
144	2.0	1.8	0.9	3.3	1.9	4.2
145	--	--	--	--	--	--
146	3.4	2.7	--	3.8	13.1	5.5
147/149	59.7	30.3	--	33.4	105.6	113.5
148	--	--	--	--	--	--
150	--	--	--	--	--	--
152	--	--	--	--	--	--

153/168	--	18.6	--	22.8	73.1	70.5
154	--	--	--	--	--	--
155	--	--	--	--	--	--
156/157	--	--	--	--	--	--
158	--	1.7	--	--	2.4	3.0
159	--	--	--	--	--	--
160	--	--	--	--	--	1.7
161	--	--	--	--	--	--
162	--	--	--	--	--	--
164	2.9	--	--	--	--	--
165	0.4	--	--	--	--	--
167	--	--	--	--	--	--
169	--	--	--	--	--	--
170	--	4.1	--	--	--	--
171/173	--	5.1	--	--	--	--
172	--	17.4	--	5.0	30.3	15.2
174	4.1	--	--	--	--	3.8
175	1.7	--	--	--	--	--
176	--	--	--	--	--	--
177	--	--	--	--	--	--
178	--	--	--	--	--	--
179	1.6	4.0	1.2	--	3.9	1.8
180/193	--	--	--	--	--	9.9
181	--	--	--	--	--	--
182	--	--	--	--	--	--
183	3.4	2.9	--	--	--	--
184	--	--	--	--	--	--
185	1.8	1.1	--	--	--	--
186	--	--	--	--	--	--
187	5.7	6.4	--	6.8	20.4	21.4
188	--	--	--	--	--	--
189	--	--	1.2	--	--	--
190	--	--	--	--	9.6	3.4
191	--	--	--	--	--	--
192	--	--	--	--	--	--
194	--	--	--	--	17.7	--
195	--	--	--	--	--	--
196	--	--	--	--	--	--
197	--	--	--	--	--	--
198/199	3.6	--	--	--	--	--
200	--	--	--	--	--	--
201	2.9	--	--	--	--	--
202	--	--	--	--	--	--

203	--	--	--	--	--	--	--
205	--	--	--	--	--	--	--
206	--	--	--	--	--	--	--
207	--	--	--	--	4.4	4.7	
208	--	7.9	1.8	4.1	33.5	83.4	
209	58.2	69.4	81.1	97.2	134.5	165.9	

Table 7: Mass of PCBs (above LOQ) emitted from colorants after 2 weeks (except for D, which was after 6 weeks) (pg).

Congener	Time (d)						
	D	E	AXX	AGF	T	ORF	REE
1	607.8	--	35.6	--	144.4	--	--
2	294.7	--	--	--	--	--	--
3	247.3	5.8	19.1	15.6	40.9	2502.6	631.1
4	1322.6	--	2981.3	--	1800.8	32.8	44.2
5	36.7	23.9	--	11.3	6.9	3.0	10.2
6	6297.9	--	1748.5	--	190.6	33.2	122.6
7	9.2	--	--	--	3.4	--	3.3
8	2588.5	--	4575.1	--	261.1	308.3	1458.2
9	17.3	4.5	29.0	--	3.7	--	10.4
10	7.8	--	15.5	2.0	8.1	--	--
11	1461.0	--	--	--	77.8	595.9	--
12/13	1289.9	--	42.0	--	--	67.7	2612.8
15	277.6	--	--	--	--	110.9	1922.8
16	--	--	--	--	--	--	--
17	38.7	--	127.0	--	--	--	--
18/30	--	--	--	--	--	--	--
19	--	--	--	--	--	--	--
20/28	--	--	--	--	--	--	--
21/33	--	--	--	--	--	--	--
22	--	--	--	--	--	--	--
23	18.7	--	2.0	1.0	--	--	--
24	--	--	--	--	--	--	--
25	33.8	--	29.4	--	--	--	--
26/29	52.2	--	--	--	--	--	--
27	--	--	--	--	--	--	--
31	--	--	--	--	--	--	--
32	--	--	--	--	--	--	--
34	6.8	--	--	--	5.8	--	--
35	--	--	0.3	--	--	--	--

36	--	--	--	--	1.9	--	--
37	--	--	--	--	--	--	--
38	--	--	0.3	--	--	--	--
39	--	--	--	--	1.0	--	--
40/71	--	--	--	--	--	--	--
41	--	--	--	--	--	--	--
42	--	--	--	--	--	--	--
43	6.6	--	--	--	--	--	--
44/47/65	--	--	--	--	--	--	--
45	--	--	--	--	--	--	--
46	--	--	--	--	--	--	--
48	--	--	--	--	--	--	--
49/69	--	--	--	--	--	--	--
50/53	--	--	--	--	--	--	--
51	--	--	--	--	--	--	--
52	--	--	--	4506.1	--	--	--
54	4.2	--	--	--	--	--	--
55	--	--	--	--	--	--	--
56	--	--	--	--	--	--	--
57	4.5	--	--	0.7	--	--	--
58	--	--	--	--	--	--	--
59/62/75	--	--	--	--	--	--	--
60	--	--	--	--	--	--	--
61/70/74/76	--	--	--	--	--	--	--
63	--	--	--	--	--	--	--
64	--	--	--	--	--	--	--
66	--	--	--	--	--	--	--
67	11.7	--	--	--	--	--	--
68	--	--	--	--	--	--	--
72	1.5	--	--	--	--	--	--
73	10.1	--	--	37.9	--	--	--
77	--	--	--	--	--	--	--
78	--	--	--	--	--	--	--
79	--	--	--	--	--	--	--
80	--	--	--	--	--	--	--
81	--	--	--	--	--	--	--
82	--	--	--	--	--	--	--
83	--	--	--	--	--	--	--
84	--	--	--	--	--	--	--
85/116	--	--	--	--	--	--	--
86/97/109/119	--	--	--	--	--	--	--
88	4.5	1.6	--	--	0.6	--	--
89	--	--	--	--	--	--	--

90/101/113	--	--	--	1001.3	--	--	--
91	--	--	--	--	--	--	--
92	13.5	--	--	56.1	--	--	--
93/100	7.1	--	--	--	--	--	--
94	2.5	--	--	--	--	--	--
95	--	--	--	--	--	--	--
96	2.6	--	--	--	--	--	--
87/125	--	--	--	--	--	--	--
98	4.3	--	--	--	--	0.7	--
99	--	--	--	--	--	--	--
102	--	--	--	--	--	--	--
103	3.4	--	--	--	--	--	--
104	2.9	--	--	--	--	--	--
105	--	--	--	--	--	--	--
106	2.8	--	--	--	--	--	--
107	--	--	--	--	--	--	--
108/124	--	--	--	--	--	--	--
110	--	--	--	--	--	--	--
111	1.4	--	--	0.7	--	--	--
112	1.5	--	--	--	--	--	--
114	--	--	--	--	--	--	--
115	--	--	--	--	--	--	--
117	--	--	--	--	--	--	--
118	--	--	--	--	--	--	--
120	0.7	--	--	--	--	--	--
121	2.1	0.7	--	--	0.4	--	--
122	--	--	--	--	--	--	--
123	--	--	--	--	--	--	--
126	--	--	--	--	--	--	--
127	--	--	--	--	--	--	--
130	1.2	--	--	--	--	--	--
131	--	--	--	--	--	1.1	--
132	--	--	--	--	--	--	--
133	2.2	--	--	--	--	--	--
134	--	--	--	--	3.4	2.9	--
135/151	23.5	--	5.5	--	--	--	--
136	16.1	--	--	--	--	--	--
137	--	--	--	--	--	--	--
139/140	--	--	--	--	--	--	--
141	--	--	--	--	--	--	--
142	10.7	--	--	--	--	--	--
143	--	--	--	--	--	--	--
144	3.6	--	--	--	--	--	--

145	--	--	--	--	--	--	--
146	11.3	--	--	--	--	--	--
147/149	--	--	--	--	--	--	--
148	--	--	--	--	--	--	--
150	--	--	--	--	--	--	--
152	--	--	--	--	--	--	--
153/168	20.5	--	--	--	--	--	--
154	--	--	--	--	--	--	--
155	--	--	--	--	--	--	--
156/157	--	--	--	--	--	--	--
158	2.2	--	1.8	--	--	--	--
159	--	--	--	--	--	--	--
160	6.2	--	--	--	--	--	--
161	1.7	--	--	--	--	--	--
162	--	--	--	--	--	--	--
164	--	--	--	--	--	--	--
165	--	--	--	--	--	0.9	--
167	--	--	--	--	--	--	--
169	--	--	--	--	--	--	--
170	--	--	--	--	32.1	--	--
171/173	3.9	--	38.2	--	8.2	--	--
172	--	--	166.9	--	33.0	--	5.8
174	9.7	--	--	--	--	--	--
175	4.7	--	--	--	--	--	--
176	2.5	--	--	--	--	--	--
177	--	--	--	--	--	--	--
178	2.9	--	--	--	--	--	--
179	5.4	--	2.0	2.6	--	--	--
180/193	18.1	--	--	--	--	--	--
181	--	--	--	--	--	--	--
182	--	--	--	--	--	--	--
183	10.0	--	--	--	--	--	--
184	--	--	--	--	--	--	--
185	1.4	--	--	--	1.1	--	--
186	--	--	--	--	--	--	--
187	21.5	--	--	--	--	--	--
188	--	--	--	--	--	--	--
189	--	--	6.1	--	82.3	--	--
190	--	--	--	--	--	--	--
191	3.6	--	--	--	--	--	--
192	--	--	--	--	13.6	--	--
194	11.2	--	--	--	8.5	8.5	60.7
195	--	--	--	--	--	--	--

196	5.2	--	--	--	--	--	--
197	--	--	--	--	--	17.7	--
198/199	17.9	--	--	--	--	--	--
200	--	--	--	--	--	2.1	--
201	7.1	--	--	--	--	--	--
202	29.1	--	--	--	--	--	13.4
203	7.2	--	--	--	--	--	--
205	3.6	--	--	--	--	--	--
206	16.8	--	--	--	--	--	--
207	17.5	--	--	--	--	--	--
208	20.6	--	--	--	--	--	--
209	227.9	--	--	--	--	--	--

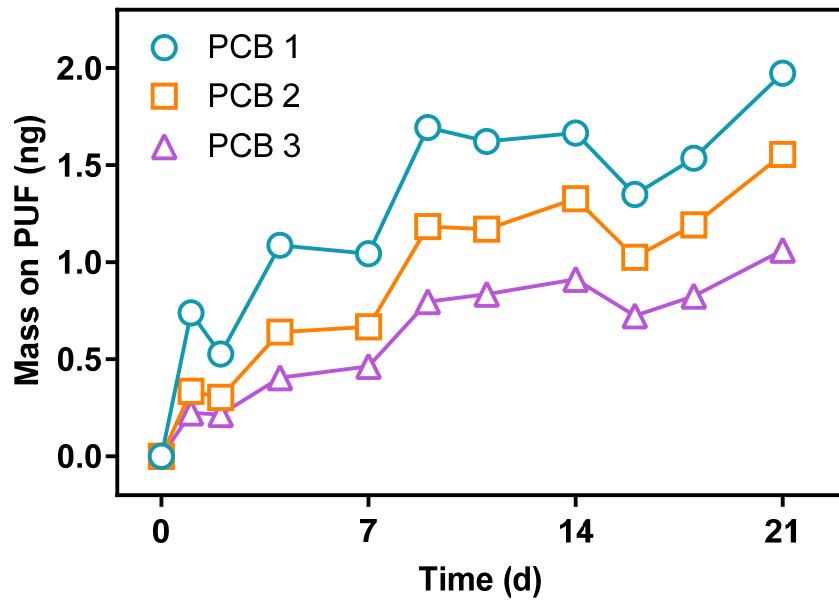


Figure 2. Change in PCB congener (1, 2, and 3) mass in the PUF-PES released from Colorant DD on drywall.

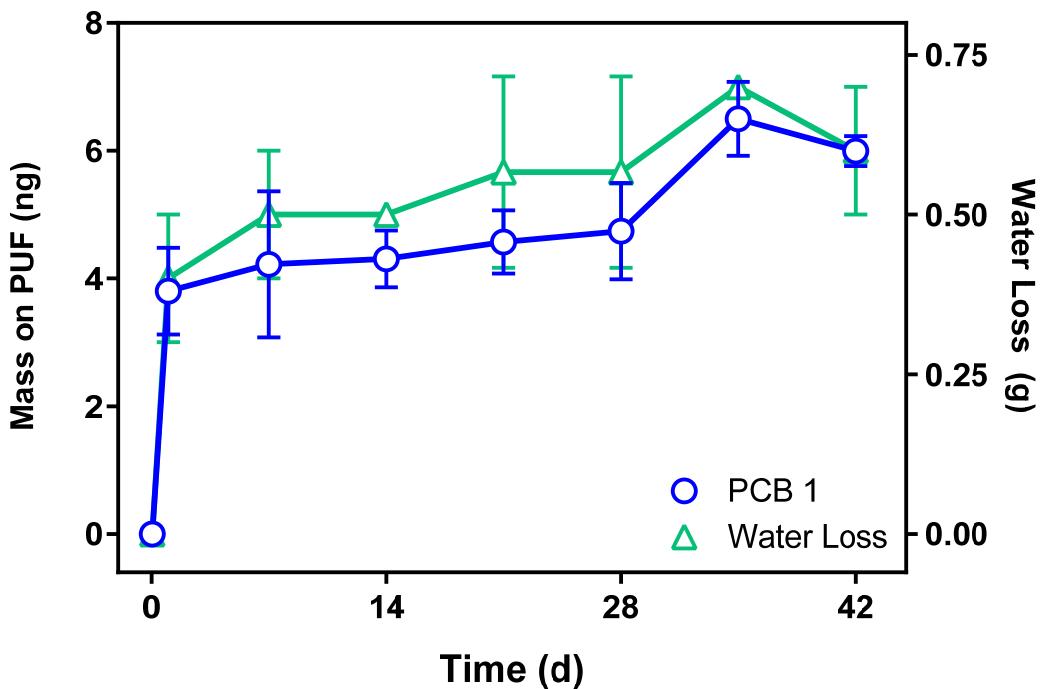


Figure 3. Accumulation of PCBs 1 and amount of water lost in colorant DD over time.

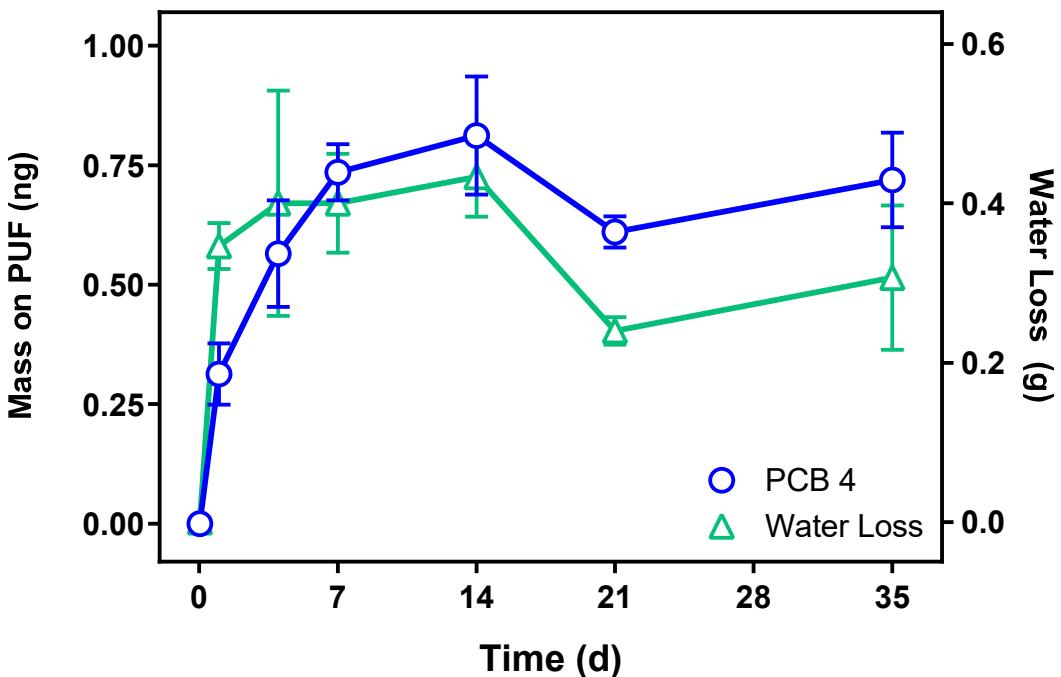


Figure 4. Accumulation of PCB 4 and amount of water lost in colorant D over time.

Modeling

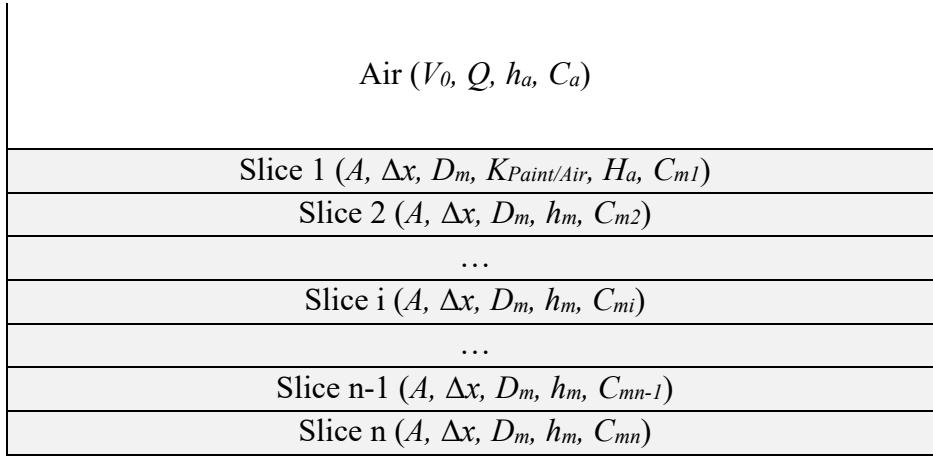


Figure 5. Representation of a diffusional source in the modified state-space method. The constants are the same as those used in Eq. 1-3.²

We assumed the colorant is represented by ten slices. The mass balance equation between the air and the top slice is shown in Eq 1:

$$V \frac{dC_a}{dt} = AK_{ol} \left(\frac{C_{m1}}{K_{Paint/Air}} - C_a \right) - QC_a \quad (1)$$

Where V is the volume air exposed to the source, C_a is the concentration in the air, A is the area of the source, K_{ol} is the overall gas-phase mass transfer coefficient, C_{m1} is the concentration of the exposed slice, $K_{Paint/Air}$ is the paint/air partition coefficient, and Q is the air change flow rate. The concentrations in the other slices can be calculated similarly to the top slice by using variations on Eq. 1 (Q and $K_{Paint/Air}$ are no longer necessary, and diffusion coefficients are used instead of mass transfer coefficients).

It is assumed that the slices behave identically and have the same solid-phase mass transfer coefficient, k_m , and are uniform within the slices. The coefficient k_m is calculated by Eq. 2:

$$k_m = \frac{D_m}{\Delta x} \quad (2)$$

where D_m is the solid-phase diffusion coefficient (assumed to remain constant), and Δx is the thickness of one slice and the travel distance for inter-slice diffusion. The overall gas-phase mass transfer coefficient, K_{ol} , is a function of the air-side and paint-side resistance:

$$\frac{1}{K_{ol}} = \frac{1}{K_{Paint/Air} k_m} + \frac{1}{k_a} \quad (3)$$

where k_a is the gas-phase mass transfer coefficient.

Values for these coefficients have not been previously measured so they must be empirically predicted. Guo et al. found $K_{Paint/Air}$ values for PCBs on the order of 10^7

(dimensionless) for various types of paint.³ Guo et al. (2012) used a proposed empirical model based on the vapor pressure of the chemical, P , and is shown in Eq. 4:⁴

$$\ln K_{ma} = 8.78 - 0.785 \ln P \quad (4)$$

Values for k_a are calculated using the “Sparks Method”:^{4,5}

$$k_a = 0.33 D_a L^{-1/3} \left(\frac{u\rho}{\mu} \right)^{2/3} \quad (5)$$

where D_a is the diffusivity of the compound in air, L is the characteristic length of the source (calculated as the square root of the source area), u is the air velocity, ρ is the air density, and μ is the viscosity of the air. D_m is calculated using:⁶

$$\log_{10} D_m - \frac{\tau - 3486}{T} = 6.39 - 2.49 * \log_{10} MW + b \quad (6)$$

where τ and b are material-specific values found in the paper, T is the temperature (K), and MW is the molecular weight of the compound.

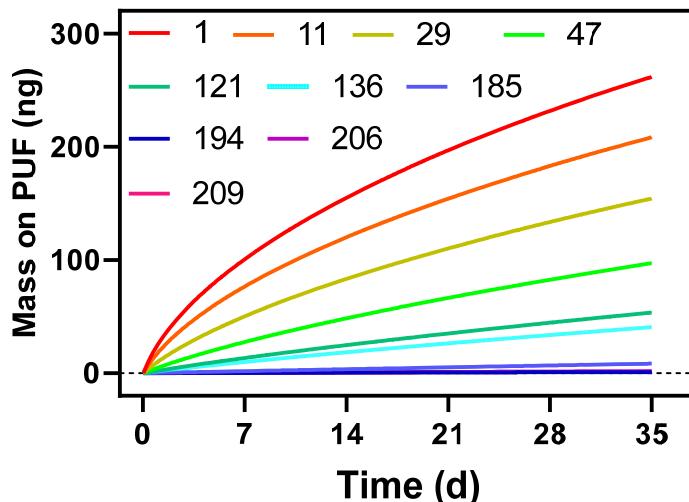


Figure 6. Predicted mass of PCBs found in PUF emitted from painted source over 5 weeks. The hypothetical painted source contained 1000 ng of each PCB. The PCBs shown are the same found in the homolog mixture containing one congener from each homolog. PCBs 194, 206, and 209 overlap.

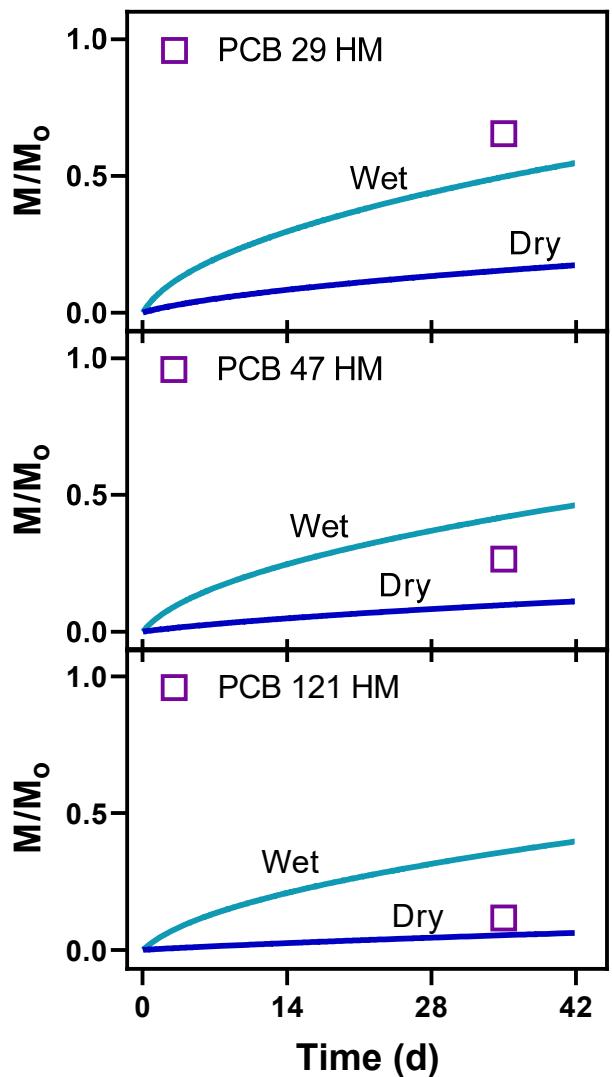


Figure 7. Measured (symbols) and predicted (lines) mass of PCB 29 (top plot), PCB 47 (middle), and PCB 121 (bottom) emitted from colorants. The mass emitted (and accumulated on the PUF) is normalized to the amount applied to the foil (M/M_0). The lines are the predicted emissions assuming the colorant is wet (top line in each plot) or dry (lower line). Points labeled 'HM' came from the homolog mixture spiked onto colorant VV.

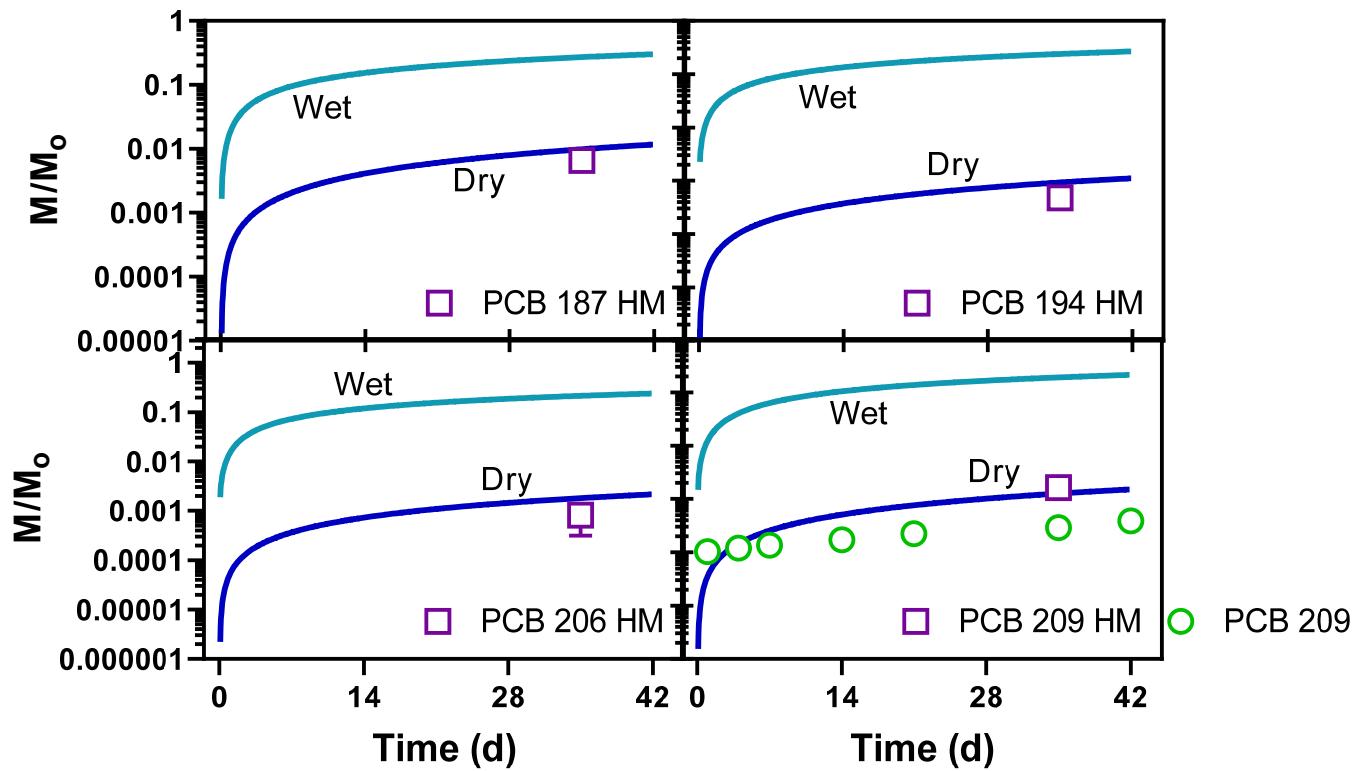


Figure 8. Measured (symbols) and predicted (lines) mass of PCB 187 (top-left), PCB 194 (top-right), PCB 206 (bottom-left), and PCB 209 (bottom-right) emitted from colorants. The mass emitted (and accumulated on the PUF) is normalized to the amount applied to the foil (M/M_0). The lines are the predicted emissions assuming the colorant is wet (top line in each plot) or dry (lower line). Points labeled ‘HM’ came from the homolog mixture spiked onto colorant VV.

Table 8: Parameters used in model to predict emissions of PCBs. These parameters were calculated from the molar mass of the PCBs and only varied between homologs. Temperature = 21.5° C (Lab Temperature).

Homolog	Molar mass	D_a ($m^2 h^{-1}$)	D_w ($m^2 h^{-1}$)	D_m Col ($m^2 h^{-1}$)	D_m PUF ($m^2 h^{-1}$)	k_a PUF-PES ($m h^{-1}$)	k_a Room ($m h^{-1}$)
1 (1-3)	188.66	8.34E-06	2.35E-06	1.54E-10	6.12E-10	17.33	3.57
2 (4-15)	223.1	7.67E-06	2.09E-06	1.02E-10	4.03E-10	15.94	3.28
3 (16-39)	257.55	7.14E-06	1.89E-06	7.11E-11	2.82E-10	14.83	3.06
4 (40-81)	291.99	6.70E-06	1.73E-06	5.20E-11	2.06E-10	13.93	2.87
5 (82-127)	326.44	6.34E-06	1.60E-06	3.94E-11	1.56E-10	13.18	2.71
6 (128-169)	360.88	6.03E-06	1.49E-06	3.07E-11	1.22E-10	12.53	2.58
7 (170-193)	395.33	5.76E-06	1.39E-06	2.44E-11	9.69E-11	11.97	2.47
8 (194-205)	429.77	5.53E-06	1.31E-06	1.99E-11	7.87E-11	11.48	2.37

9 (206-208)	464.22	5.32E-06	1.24E-06	1.64E-11	6.49E-11	11.05	2.28
10 (209)	498.66	5.13E-06	1.18E-06	1.37E-11	5.43E-11	10.66	2.20

Table 9: Parameters used in model to predict emissions of PCBs.

PCB	Henry's Constant (dimensionless) ⁷	K _{ma} (dimensionless)	K _{PUF} (dimensionless) ⁸
1	82.1	8.17E+05	3.58e+05
2	85.6	8.17E+05	3.58e+05
3	89.2	8.17E+05	3.58e+05
4	74.4	6.57E+05	4.09e+05
5	102.5	1.24E+06	5.49e+05
6	74.9	1.15E+06	5.09e+05
7	64.9	1.07E+06	4.73e+05
8	80.6	1.26E+06	5.59e+05
9	75.6	1.03E+06	4.56e+05
10	57.7	6.82E+05	4.22e+05
11	84.2	1.25E+06	5.54e+05
12	104.6	2.29E+06	1.03e+06
13	96.3	2.25E+06	1.01e+06
14	58.1	2.25E+06	1.01e+06
15	109.0	2.21E+06	9.95e+05
16	97.4	2.50E+06	1.23e+06
17	65.5	2.21E+06	1.11e+06
18	76.5	2.05E+06	1.04e+06
19	55.4	1.40E+06	7.64e+05
20	112.6	4.63E+06	2.13e+06
21	107.8	4.72E+06	2.17e+06
22	128.1	5.16E+06	2.38e+06
23	76.8	3.41E+06	1.55e+06
24	77.4	3.89E+05	2.66e+05
25	77.4	3.94E+06	1.80e+06
26	82.1	3.80E+06	1.74e+06
27	60.5	2.37E+06	1.18e+06
28	85.6	4.39E+06	2.02e+06
29	82.7	3.00E+06	1.36e+06
30	42.7	2.05E+06	1.04e+06
31	89.2	4.15E+06	1.91e+06
32	62.5	2.74E+06	1.33e+06
33	102.0	4.72E+06	2.17e+06
34	58.0	3.41E+06	1.55e+06
35	57.9	9.04E+06	4.24e+06

36	72.7	6.65E+06	3.09e+06
37	160.9	9.89E+06	4.65e+06
38	105.3	9.72E+06	4.57e+06
39	81.8	9.72E+06	4.57e+06
40	133.8	9.54E+06	3.70e+06
41	100.1	9.54E+06	3.70e+06
42	95.6	8.72E+06	3.43e+06
43	73.0	6.65E+06	2.75e+06
44	106.3	7.96E+06	3.19e+06
45	69.0	4.72E+06	2.07e+06
46	72.2	7.34E+06	2.98e+06
47	66.5	7.54E+06	3.05e+06
48	80.8	7.28E+06	2.96e+06
49	69.3	6.89E+06	2.83e+06
50	42.6	5.96E+06	2.51e+06
51	47.9	5.16E+06	2.23e+06
52	76.7	6.41E+06	2.67e+06
53	56.8	4.15E+06	1.87e+06
54	42.7	9.12E+06	3.56e+06
55	134.1	9.12E+06	4.28e+06
56	161.6	2.00E+07	9.60e+06
57	90.5	2.00E+07	9.60e+06
58	97.8	2.00E+07	9.60e+06
59	80.5	2.04E+07	6.91e+06
60	160.2	2.04E+07	9.78e+06
61	102.7	1.70E+07	8.12e+06
62	66.2	1.70E+07	5.96e+06
63	100.8	1.42E+07	6.75e+06
64	89.9	8.41E+06	3.33e+06
65	72.7	7.96E+06	3.19e+06
66	120.7	1.67E+07	7.97e+06
67	104.6	1.45E+07	6.87e+06
68	64.9	9.80E+06	4.61e+06
69	48.4	6.65E+06	2.75e+06
70	120.9	1.58E+07	7.54e+06
71	77.9	9.89E+06	3.81e+06
72	67.5	1.25E+07	5.92e+06
73	47.0	1.41E+07	5.09e+06
74	113.9	1.58E+07	7.54e+06
75	52.7	1.57E+07	5.57e+06
76	102.5	1.55E+07	7.40e+06
77	238.5	4.05E+07	1.98e+07
78	149.8	2.70E+07	1.30e+07

79	124.0	2.20E+07	1.06e+07
80	65.2	1.80E+07	8.59e+06
81	170.8	2.49E+07	1.20e+07
82	167.3	2.93E+07	9.31e+06
83	115.5	3.44E+07	1.06e+07
84	97.4	1.76E+07	6.14e+06
85	127.2	2.27E+07	7.56e+06
86	102.7	2.93E+07	9.31e+06
87	133.2	3.03E+07	9.59e+06
88	63.6	1.55E+07	5.53e+06
89	82.1	1.98E+07	6.76e+06
90	83.1	2.53E+07	8.26e+06
91	70.7	1.67E+07	5.87e+06
92	94.1	2.08E+07	7.02e+06
93	71.9	1.45E+07	5.21e+06
94	62.5	1.42E+07	5.13e+06
95	81.6	1.39E+07	5.06e+06
96	59.6	2.02E+07	6.86e+06
97	136.0	2.93E+07	9.31e+06
98	62.5	1.47E+07	5.29e+06
99	98.1	2.53E+07	8.26e+06
100	43.5	2.40E+07	7.90e+06
101	99.7	2.27E+07	7.56e+06
102	66.0	1.79E+07	6.20e+06
103	48.6	1.41E+07	5.09e+06
104	33.0	3.40E+07	1.05e+07
105	246.3	8.20E+07	4.09e+07
106	148.4	6.66E+07	3.31e+07
107	153.7	5.41E+07	2.67e+07
108	139.2	5.76E+07	1.63e+07
109	86.8	4.54E+07	2.23e+07
110	124.6	3.57E+07	1.10e+07
111	91.7	3.12E+07	1.51e+07
112	91.7	2.72E+07	8.77e+06
113	75.1	3.38E+07	1.05e+07
114	171.2	7.16E+07	3.56e+07
115	99.7	3.57E+07	1.10e+07
116	82.7	3.38E+07	1.05e+07
117	101.5	3.20E+07	1.00e+07
118	194.8	6.14E+07	3.04e+07
119	78.8	2.93E+07	9.31e+06
120	99.7	2.36E+07	1.14e+07
121	43.8	1.90E+07	6.51e+06

122	194.8	3.44E+07	1.68e+07
123	140.5	6.25E+07	3.10e+07
124	143.4	4.94E+07	2.43e+07
125	85.0	3.91E+07	1.18e+07
126	298.9	1.42E+08	7.21e+07
127	156.9	1.51E+08	7.66e+07
128	235.8	1.60E+08	3.77e+07
129	174.8	1.22E+08	3.01e+07
130	160.5	1.04E+08	2.64e+07
131	101.1	7.10E+07	1.93e+07
132	120.7	6.72E+07	1.85e+07
133	120.1	6.03E+07	1.69e+07
134	106.5	5.41E+07	1.54e+07
135	91.1	4.20E+07	1.25e+07
136	76.0	2.63E+07	8.51e+06
137	131.7	1.72E+08	4.00e+07
138	188.2	1.18E+08	2.93e+07
139	74.4	5.61E+07	1.59e+07
140	79.5	7.29E+07	1.97e+07
141	140.8	9.48E+07	2.45e+07
142	77.7	7.10E+07	1.93e+07
143	83.1	5.31E+07	1.52e+07
144	82.7	6.48E+07	1.79e+07
145	52.1	2.77E+07	8.90e+06
146	130.5	7.63E+07	2.05e+07
147	77.5	6.14E+07	1.71e+07
148	57.0	5.51E+07	1.57e+07
149	103.2	4.94E+07	1.43e+07
150	48.4	4.48E+07	1.32e+07
151	86.4	4.05E+07	1.22e+07
152	57.2	5.92E+07	1.66e+07
153	148.4	8.66E+07	2.27e+07
154	64.1	4.20E+07	1.25e+07
155	29.1	1.09E+08	2.74e+07
156	276.4	2.80E+08	1.45e+08
157	289.4	2.85E+08	1.48e+08
158	148.1	1.24E+08	3.06e+07
159	157.2	1.18E+08	5.94e+07
160	114.4	1.15E+08	2.86e+07
161	85.8	1.13E+08	2.83e+07
162	186.0	1.12E+08	5.65e+07
163	147.8	1.11E+08	2.80e+07
164	138.9	1.53E+08	3.63e+07

165	88.8	1.79E+08	4.14e+07
166	132.9	1.94E+08	4.41e+07
167	222.6	2.10E+08	1.08e+08
168	88.6	3.42E+08	7.04e+07
169	375.4	5.57E+08	2.94e+08
170	280.3	5.00E+08	9.62e+07
171	141.8	2.30E+08	5.07e+07
172	205.4	3.12E+08	6.54e+07
173	134.1	2.40E+08	5.27e+07
174	144.7	1.85E+08	4.25e+07
175	109.5	1.39E+08	3.35e+07
176	82.3	8.66E+07	2.27e+07
177	149.8	1.99E+08	4.51e+07
178	114.7	1.24E+08	3.06e+07
179	88.8	7.49E+07	2.02e+07
180	227.8	3.55E+08	7.25e+07
181	106.3	2.28E+08	5.04e+07
182	95.2	1.46E+08	3.50e+07
183	121.5	1.63E+08	3.83e+07
184	53.4	1.69E+08	3.94e+07
185	114.2	1.75E+08	4.06e+07
186	66.5	1.60E+08	3.77e+07
187	120.7	1.46E+08	3.50e+07
188	55.2	3.66E+08	7.44e+07
189	36.8	9.16E+08	4.89e+08
190	218.0	5.37E+08	1.02e+08
191	183.9	3.95E+08	7.93e+07
192	127.8	3.12E+08	6.54e+07
193	182.2	3.55E+08	7.25e+07
194	365.2	1.71E+09	2.65e+08
195	206.3	9.08E+08	1.57e+08
196	187.3	6.21E+08	1.15e+08
197	96.5	3.39E+08	6.99e+07
198	158.7	5.37E+08	1.02e+08
199	107.8	3.12E+08	6.54e+07
200	101.8	2.34E+08	5.15e+07
201	187.3	6.21E+08	1.15e+08
202	109.5	2.06E+08	4.64e+07
203	174.4	6.44E+08	1.19e+08
204	71.0	3.18E+08	6.63e+07
205	280.3	6.15E+08	1.14e+08
206	280.3	8.56E+08	1.50e+08
207	144.7	1.01E+09	1.72e+08

208	146.4	1.19E+09	1.97e+08
209	217.0	1.21E+09	1.99e+08

Table 10. Calculated values used in the model to predict PCB emissions from paint in a 10 x 10 x 5 (m^3) room.

PCB	1	3	8	11	52
CO ($\mu\text{g M}^{-3}$)	262	153	779	716	145
K _{paint/air} (dimensionless)	8.17×10^5	8.17×10^5	1.26×10^6	1.25×10^6	6.41×10^6
Henry's constant (dimensionless)	82.1	89.2	80.6	84.2	76.7
K _a (m h^{-1})	3.57	3.57	3.28	3.28	2.87
D _m ($\text{m}^2 \text{ h}^{-1}$)	1.54×10^{-10}	1.54×10^{-10}	1.02×10^{-10}	1.02×10^{-10}	5.20×10^{-11}
Q (h^{-1})	1				
Wind Speed (m s^{-1})	0.4				
Source thickness (m)	0.0005				
Source area (m^2)	200				
Room volume (m^3)	500				

Table 11. Values of K_{Paint/Air}, k_a, and D_{water} from various sources. These are used to compare to the values in Table 10.

PCB	18	52	110	187
K _{paint/air} (dimensionless) ³	2.09×10^6	6.54×10^6	3.64×10^7	1.49×10^8
k _a (m h^{-1}) ²	1, 10			
D _{water} ($\text{m}^2 \text{ h}^{-1}$) ⁹	1.69×10^{-6}	1.61×10^{-6}	1.54×10^{-6}	1.42×10^{-6}
D _m ($\text{m}^2 \text{ h}^{-1}$) ²	$1 \times 10^{-10}, 1 \times 10^{-11}$			

References:

- (1) Jahnke, J. C.; Hornbuckle, K. C. Dataset for PCB Emissions from Paint Colorants. University of Iowa. (dataset). **2019**. <https://doi.org/10.25820/vtd8-n771>.
- (2) Guo, Z. A Framework for Modelling Non-Steady-State Concentrations of Semivolatile Organic Compounds Indoors – I: Emissions from Diffusional Sources and Sorption by Interior Surfaces. *Indoor Built Environ.* **2013**, 22 (4), 685–700.
- (3) Guo, Z.; Liu, X.; Krebs, K. A.; Greenwell, D. J.; Roache, N. F.; Stinson, R. A.; Nardin, J. A.; Pope, R. H. Laboratory Study of Polychlorinated Biphenyl (PCB) Contamination and Mitigation in Buildings Part 2. Transport from Primary Sources to Building Materials and Settled Dust; U.S. Environmental Protection Agency. **2012**. Report EPA/600/R-11/156A.
- (4) Guo, Z. Review of Indoor Emission Source Models. Part 2. Parameter Estimation.

Environ. Pollut. **2002**, *120* (3), 551–564.

- (5) Tian, S.; Sebroski, J.; Ecoff, S. Predicting TCPP Emissions and Airborne Concentrations from Spray Polyurethane Foam Using USEPA I-SVOC Software: Parameter Estimation and Result Interpretation. In *Developing Consensus Standards for Measuring Chemical Emissions from Spray Polyurethane Foam (SPF) Insulation*; ASTM International: 100 Barr Harbor Drive, PO Box C700, West Conshohocken, PA 19428-2959, 2017; pp 167–198.
- (6) Huang, L.; Fantke, P.; Ernstaff, A.; Jolliet, O. A Quantitative Property-Property Relationship for the Internal Diffusion Coefficients of Organic Compounds in Solid Materials. *Indoor Air* **2017**, *27* (6), 1128–1140.
- (7) Dunnivant, F. M.; Elzerman, A. W.; Jurs, P. C.; Hasan, M. N. Quantitative Structure-Property Relationships for Aqueous Solubilities and Henry's Law Constants of Polychlorinated Biphenyls. *Environ. Sci. Technol.* **1992**, *26*, 1567–1573.
- (8) Shoeib, M.; Harner, T. Characterization and Comparison of Three Passive Air Samplers for Persistent Organic Pollutants. *Environ. Sci. Technol.* **2002**, *36* (19), 4142–4151.
- (9) Achman, D. R.; Hornbuckle, K. C.; Eisenreich, S. J. Volatilization of Polychlorinated Biphenyls from Green Bay, Lake Michigan. *Environ. Sci. Technol.* **1993**, *27* (1), 75–87.