

Organické látky

Organická geochemie a rozpuštěný organický uhlík

- struktura, nomenklatura a funkční skupiny
- huminové látky a další přírodní „OC“
- reaktivita
- DOC/POC distribuce
- kyselost (acidita)

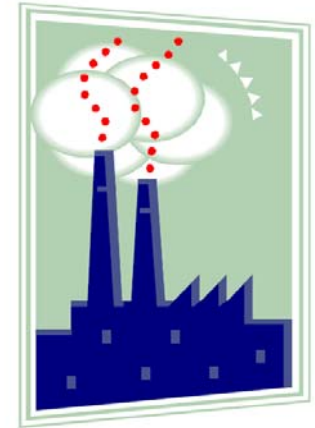
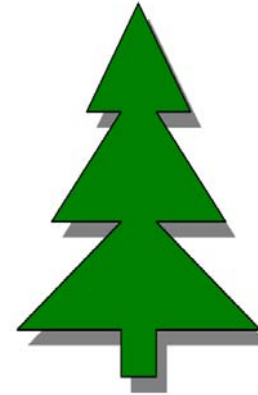
Přírodní a znečišťující organické látky

- funkční skupiny
- rozpustnost ve vodě
- reaktivita v prostředí

Organické látky

1. Organický uhlík v hydrosféře

Organický uhlík se v hydrosféře vyskytuje jako
přírodní a kontaminující
a dále jako
rozpuštěný a suspendovaný



DOC = rozpuštěný organický uhlík (dissolved organic carbon); zahrnuje huminové látky (a huminové kyseliny při $\text{pH} > 2$).

POC = suspendovaný organický uhlík (particulate organic carbon); zahrnuje huminové látky (a huminové kyseliny při $\text{pH} < 2$).

Koncentrace DOC a POC je velmi proměnlivá, obecně je vyšší ve vodách s vyšší fotosyntetickou aktivitou

Organické látky

Příklady běžných organických molekul **přírodního** původu

- jednoduché organické látky syntetizované organismy – metanol CH_3OH , etanol $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$
- biomolekuly – chlorofyl, aminokyseliny, bílkoviny
- fosilizované biomolekuly – složky ropy

Běžné organické **polutanty** v přírodě

- pesticidy, insekticidy, herbicidy, fungicidy
- uhlovodíky, které jsou součástí benzínu a nafty
- biologické odpady – neupravované komunální vody
- plynné kontaminanty z různých zdrojů

Organické látky

2. Nomenklatura

Organické látky jsou založeny na řetězcích $-C-C-$ s navázanými H, které mohou obsahovat také další „funkční skupiny“, které nahrazují H a C.

Strukturní názvy jsou založeny na počtu C a způsobu, jakým se váží. Každý uhlík má 4 vazby.

Molekuly obsahující pouze C a H

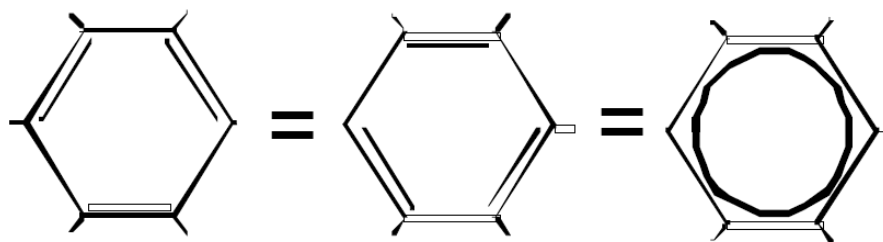
Alkany jen jednoduché C–C vazby

Alkeny nejméně jedna dvojná vazba C=C

Alkyny nejméně jedna trojná vazba C≡C

Aryly speciální konjugované C=C vazby v kruhové struktuře

benzen C_6H_6



Organické látky

2. Nomenklatura

1 carbon:	Methane	<i>note: when one of these molecules is attached to another molecule, it take the names "methyl", "ethyl" or "ethylene" group for methane-like, ethane-like, and ethene like functionalities, etc..</i>
2 carbon:	Ethane ($\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$) Ethene ($\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$) Ethyne aka acetylene ($\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$)	
3 carbon:	Propane ($\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$) Propene ($\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{CH}_3$) Propyne ($\text{HC}\equiv\text{C}-\text{CH}_3$)	

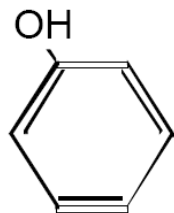
Funkční skupiny určují reaktivitu a rozpustnost ve vodě. Obecně platí, že čím více je funkčních skupin, tím je molekula rozpustnější a tím je reaktivnější.

name	formula	Alternate names:
a. Ethyl Alcohol (ethanol):	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ (= ethane + alcohol)	1-hydroxy-ethane
b. Propyl Amine:	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$	1-amino propane
c. <i>iso</i> -Propyl Amine:	$\text{CH}_3\text{CHNH}_2\text{CH}_3$	2-amino propane

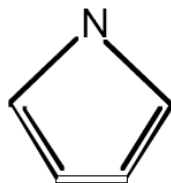
Organické látky

2. Nomenklatura

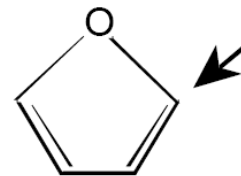
Běžné funkční skupiny



phenols



pyrroles



furans

*the points of
the polygons are
carbon atoms,
with one hydrogen
atom attached*

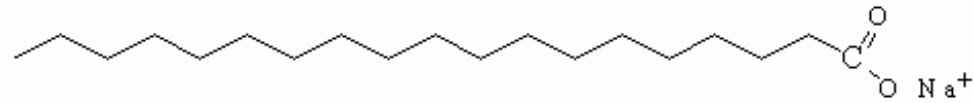
Funkční skupiny mohou být kyselé nebo bazické. Přidání náboje organické molekule ji obecně činí rozpustnější a zvyšuje její reaktivitu s kovy v roztoku.

Čím je molekula bazičtější (elektronový donor), tím více interaguje s anorganickými iony a pevnými povrchy (dnové sedimenty...). Výjimkou jsou halogenované uhlovodíky.

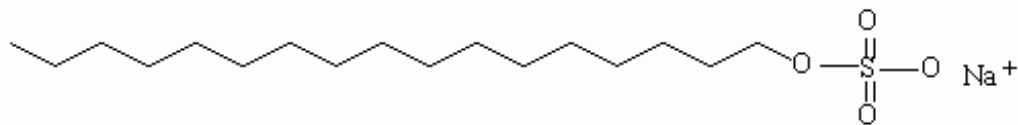
Organické látky

Příklady

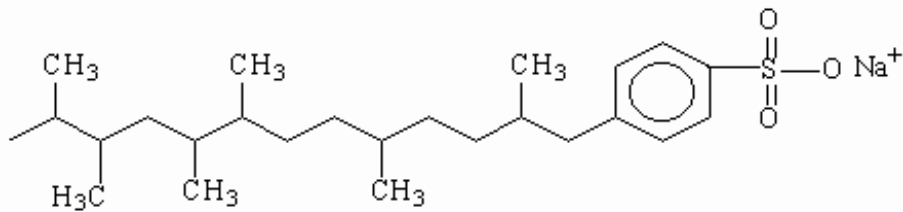
Mýdlo



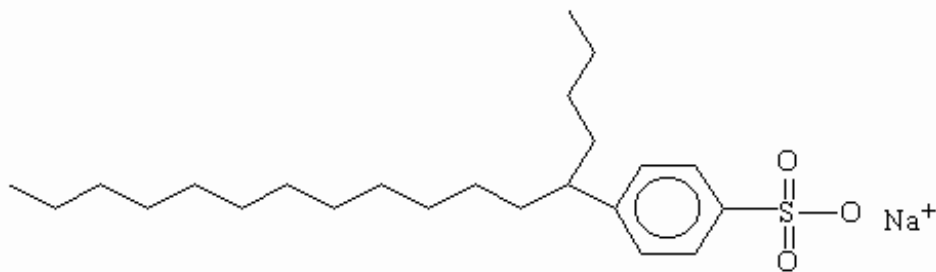
Alkyl sulfátové povrchově aktivní látky



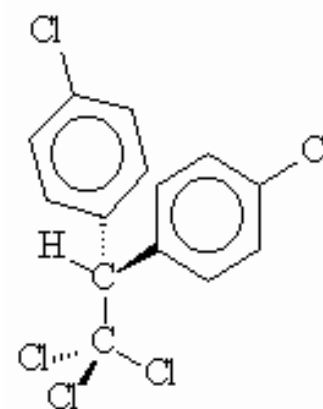
Alkylbenzen sulfonát (ABS)



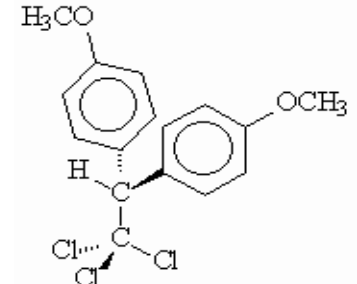
Lineární alkyl sulfonát (LAS)



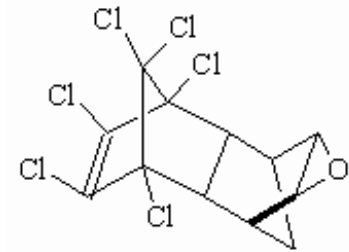
Organochlorované insekticidy



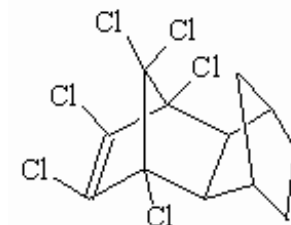
DDT



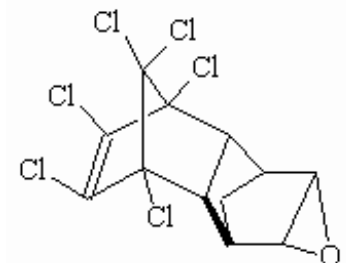
Methoxychlor



Dieldrin

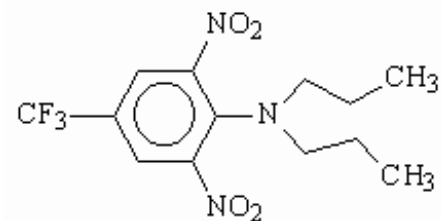


Aldrin



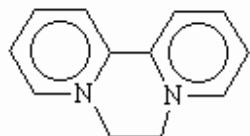
Endrin

Nitroanilinové herbicidy

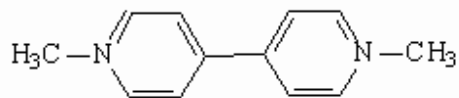


Trifluralin

Dipyridilium herbicidy

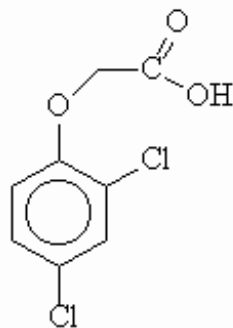


Diquat

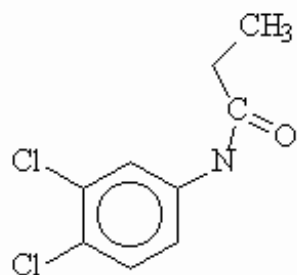


Paraquat

Běžné herbicidy

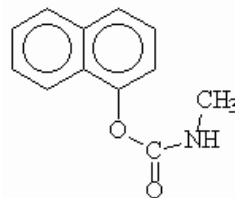


2,4-Dichlorophenoxyacetic acid

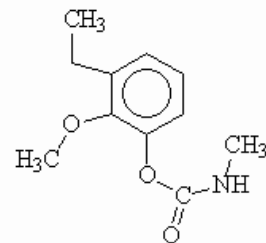


Propanil

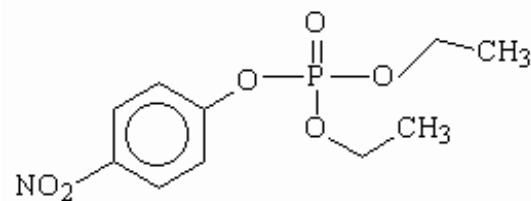
Běžné insekticidy



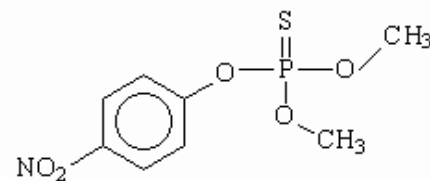
Carbaryl



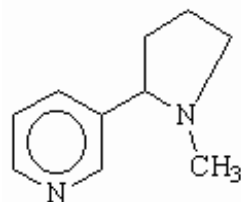
Carbofuran



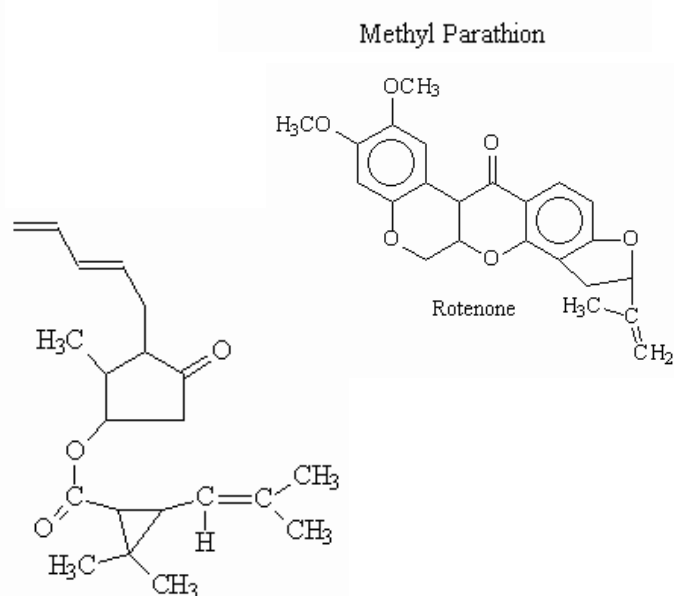
Ethyl Parathion



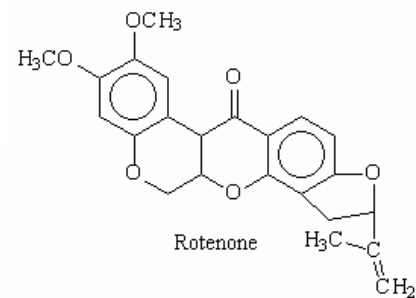
Methyl Parathion



Nicotine

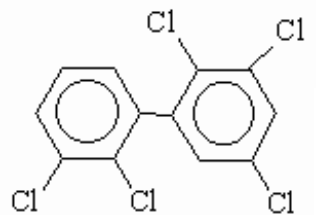
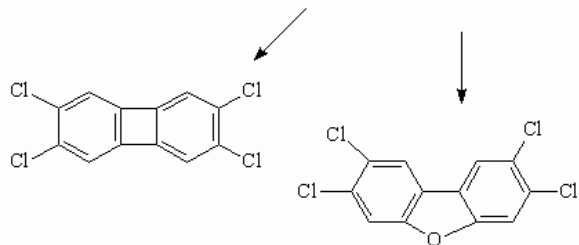


Allethrin



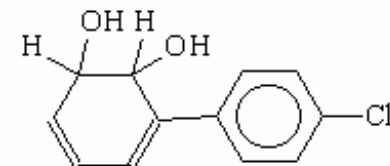
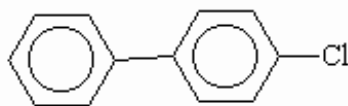
Rotenone

Polychlorované bifenyly

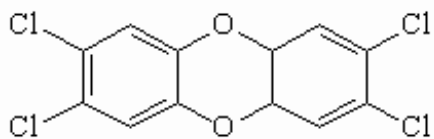


Polychlorinated Biphenyl

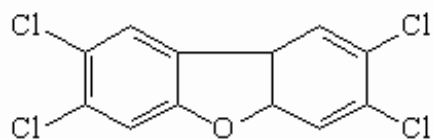
Polychlorované bifenyly –
přírodní degradace



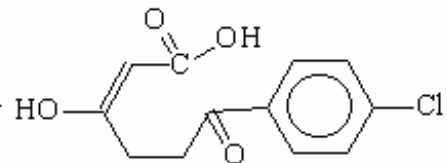
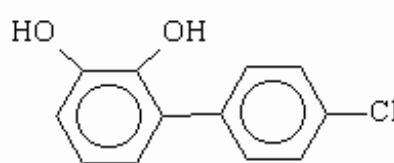
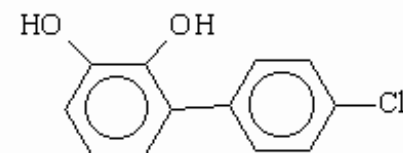
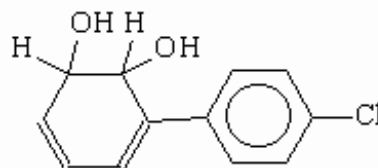
Dioxiny a furany



2,3,7,8-Tetrachlorodibenzo-p-dioxin



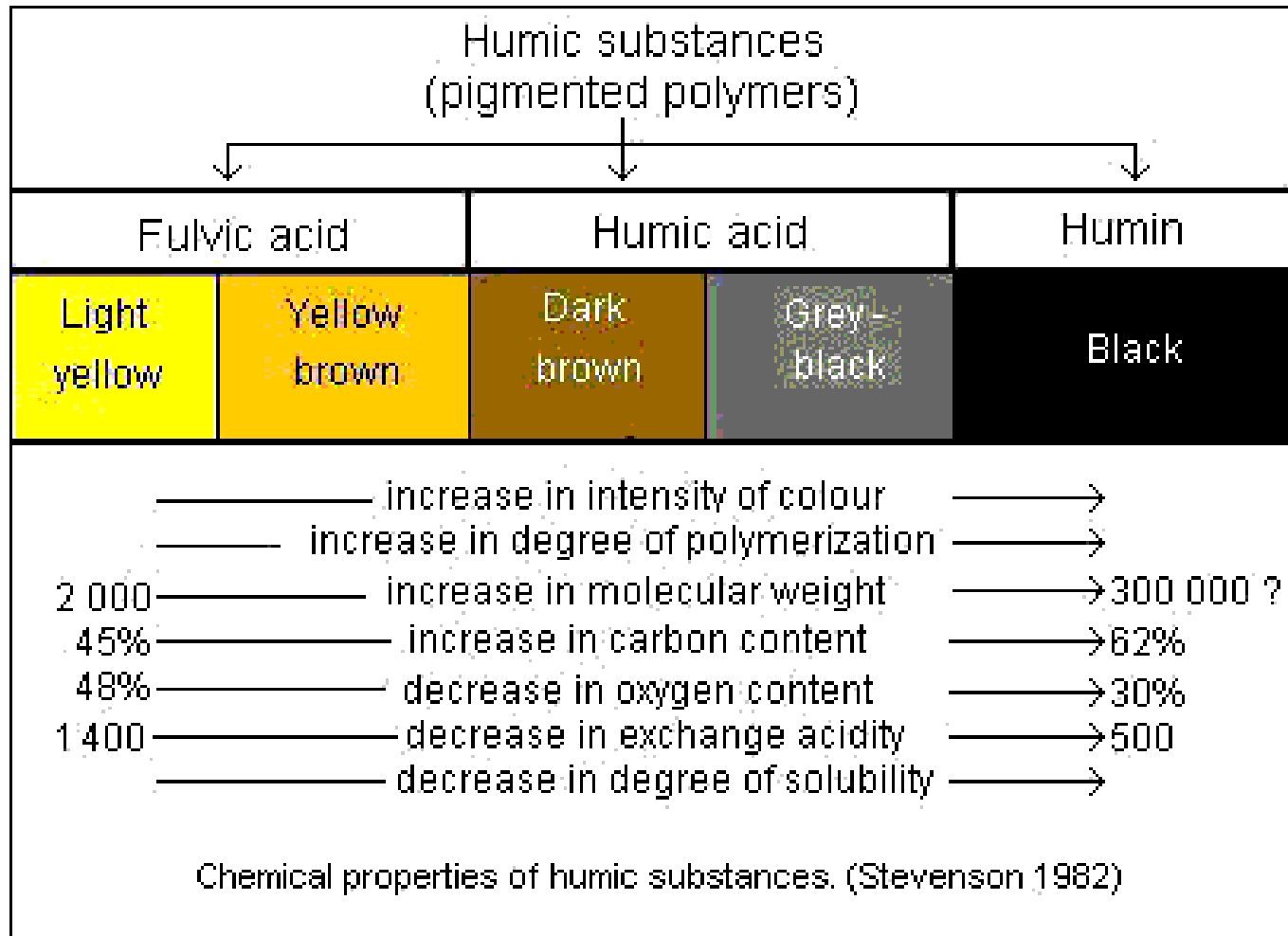
2,3,7,8-Tetrachlorodibenzo-p-furan



Organické látky

2. Nomenklatura

Huminové látky – zvláštní skupina velmi důležitých organických látek, vysoce substituovaných, které vznikají rozkladem přírodní organické hmoty.



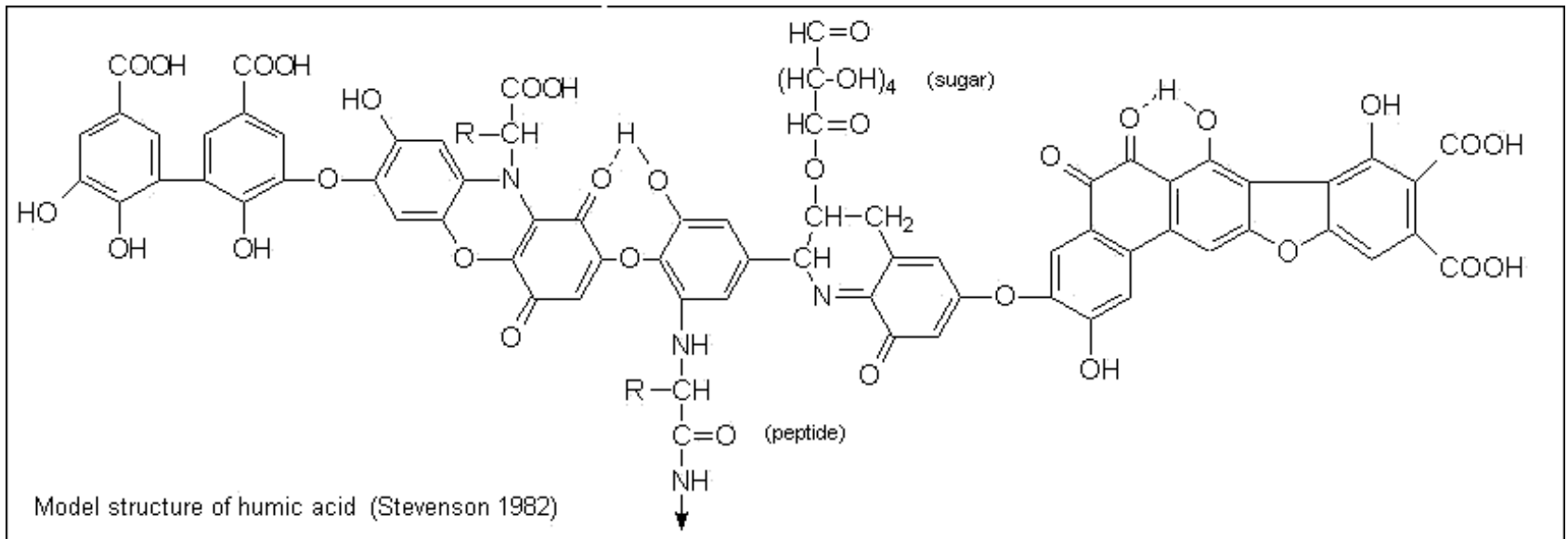
Organické látky

Huminové látky – dvě skupiny:

- **huminy** – nerozpustné v H_2O při všech pH (pevné nebo POC)
- **huminové kyseliny** – nerozpustné při $pH < 2$

Složitě navzájem příbuzné látky, mořské a sladkovodní se podstatně liší.

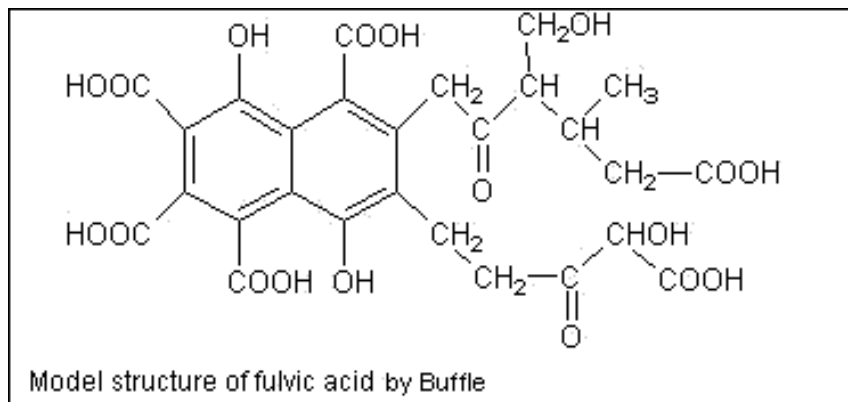
Představují až 95 % DOC ve vodném systému a jsou často přítomny ve stejné nebo vyšší koncentraci než anorganické iony.



HA obsahují aromatickou „páteř“ propojenou cukry, proteiny, aminokyselinami a dalšími zbytkovými rezidui. Spolu s rozpuštěnými karbonátovými látkami jsou hlavními regulátory pH.

Organické látky

Huminové látky

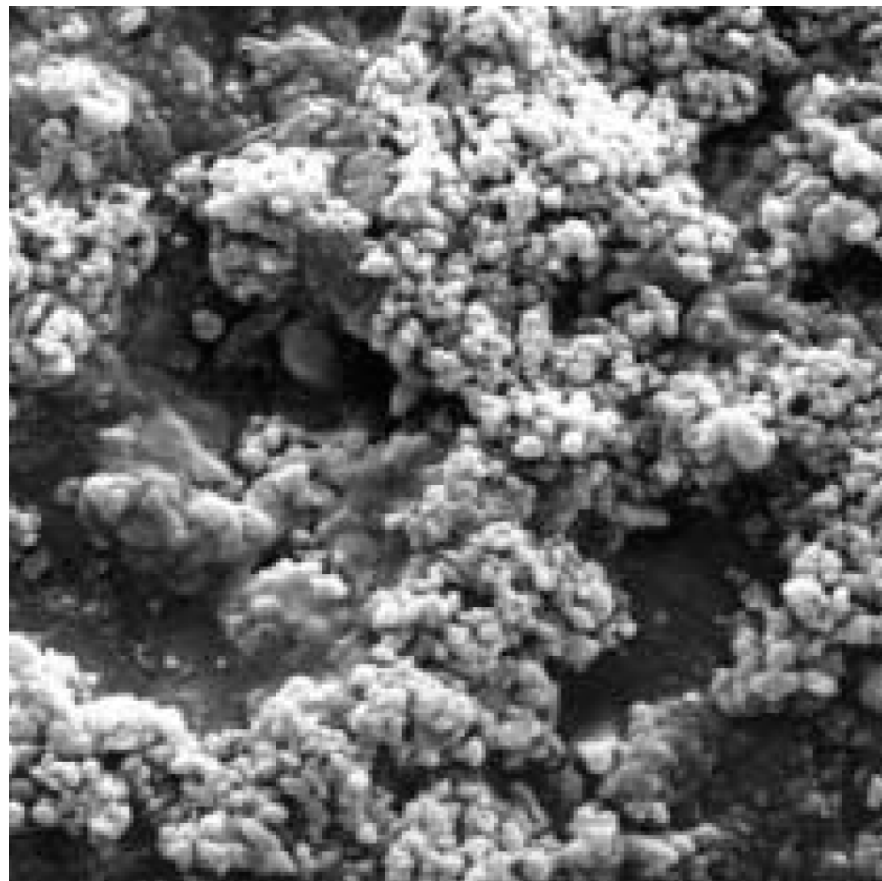


Působí jako chelatační činidla a slouží jako zdroj potravy pro mikroorganismy.

Určují obsahy:

- mikrosložek živin
- toxických kovů
- radionuklidů
- halogenů

Obsahují „dlouhožijící“ volné radikály, které mohou redukovat Hg, Cr, Pu.



HA – SE 2000×

Organické látky

3. Reaktivita

Určuje osud přírodních biomolekul v prostředí, typ nebezpečí, které je spojeno s působením polutantu v prostředí...

Závisí na mnoha faktorech. V principu platí tato řada podle zvyšující se reaktivity

Alkany < alkeny (konjugované alkeny < nekonjug. alkeny) < alkyny < aromatické

Molekuly, které obsahují pouze uhlík, vodík a halogenidy nejsou rozpustné ve vodě.

Molekuly, které obsahují pouze uhlík, vodík a halogenidy jsou rozpustné v tucích.

Molekuly, které obsahují pouze uhlík, vodík a halogenidy jsou těkavé.

Molekuly, které obsahují kyslík, jsou rozpustnější než jejich bezkyslíkaté analogy.

Molekuly, které obsahují kyslík, jsou méně těkavé než jejich bezkyslíkaté analogy.

Nasycené molekuly, které obsahují pouze uhlík, vodík a halogenidy nejsou reaktivní.

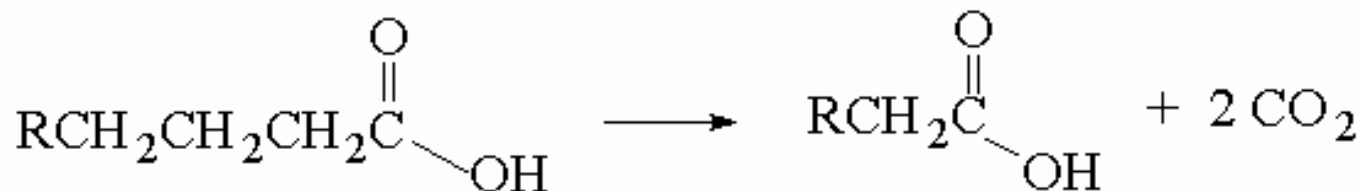
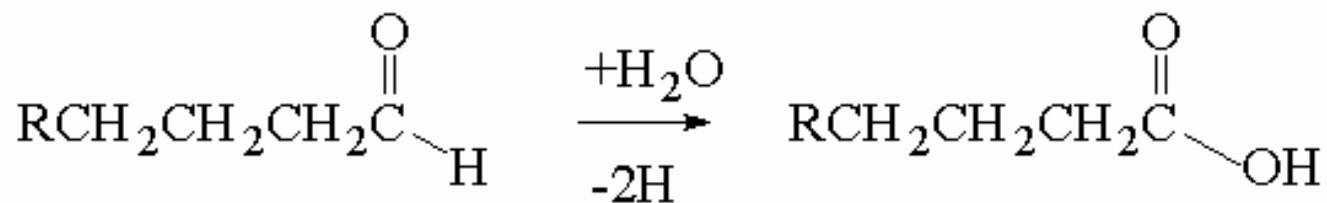
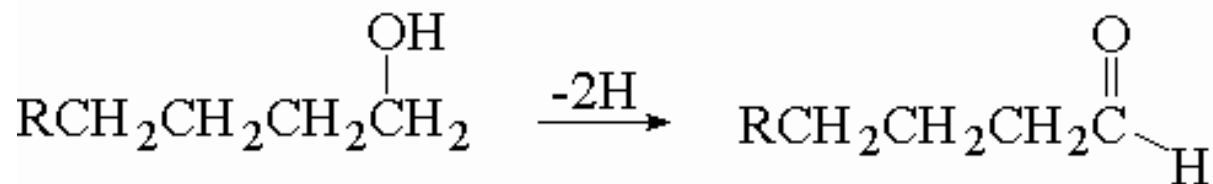
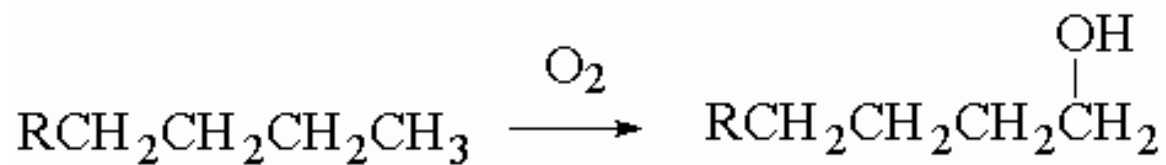
Rozvětvené molekuly, jsou méně reaktivní než přímé řetězce.

Molekuly, které obsahují dvojitě nebo trojitě vazby jsou reaktivnější než jejich nasycené analogy.

Molekuly, které obsahují kyslík jsou reaktivnější než jejich bezkyslíkaté analogy.

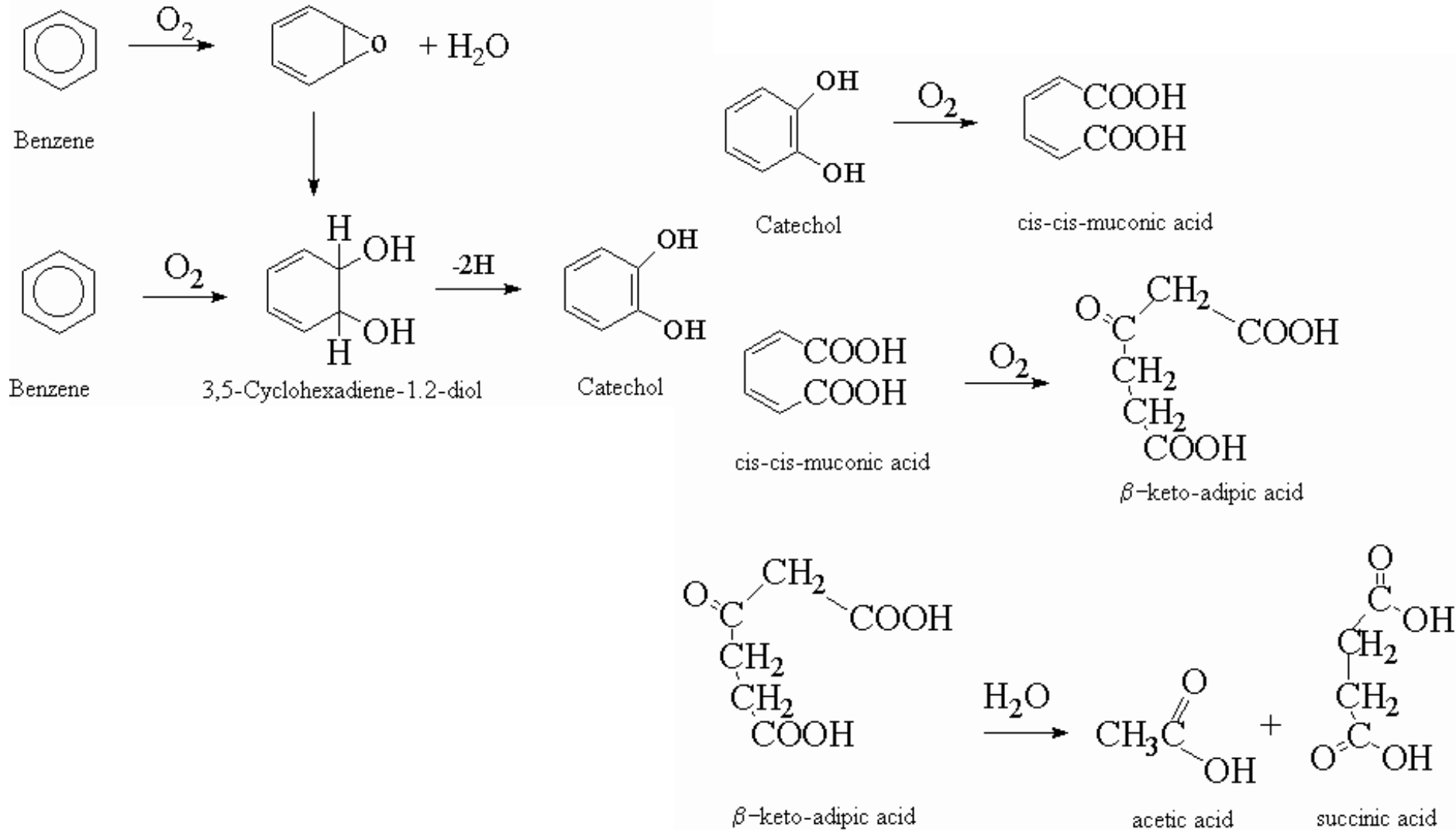
Oxidace alifatických uhlovodíků (často za účasti mikroorganismů)

Alkohol → aldehyd → karboxylová kyselina → karboxylová kyselina kratší o 2 C

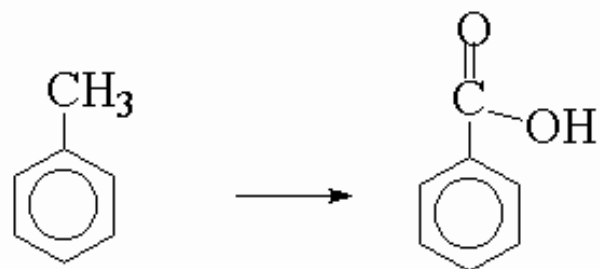


Oxidace aromatických uhlovodíků (a PAH)

„epoxid“ → 3,5-cyklohexadien-1,2-diol → katechol → kyselina octová a sukcinová

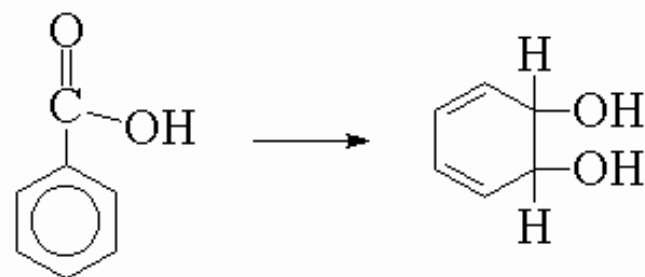


U složitějších a kombinovaných látek postupně podle těchto schémat



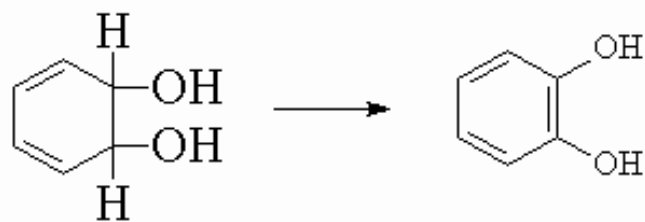
Toluene

Benzoic Acid



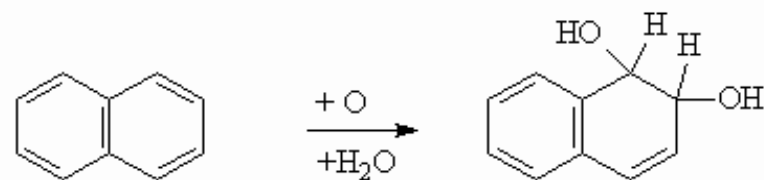
Benzoic Acid

3,5-Cyclohexadiene-1,2-diol

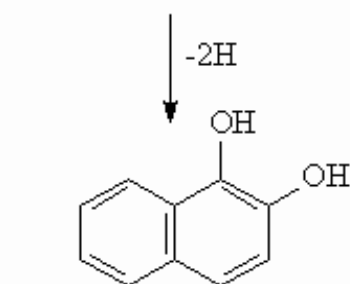


3,5-Cyclohexadiene-1,2-diol

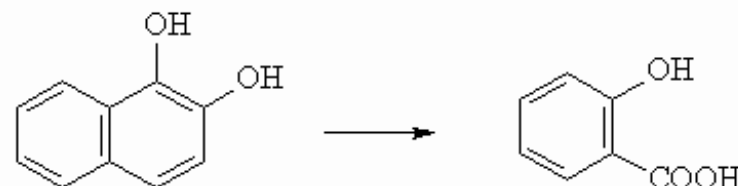
Catechol



Naphthalene



1,2-dihydroxynaphthalene



1,2-dihydroxynaphthalene

Salicylic Acid



Salicylic Acid

Catechol

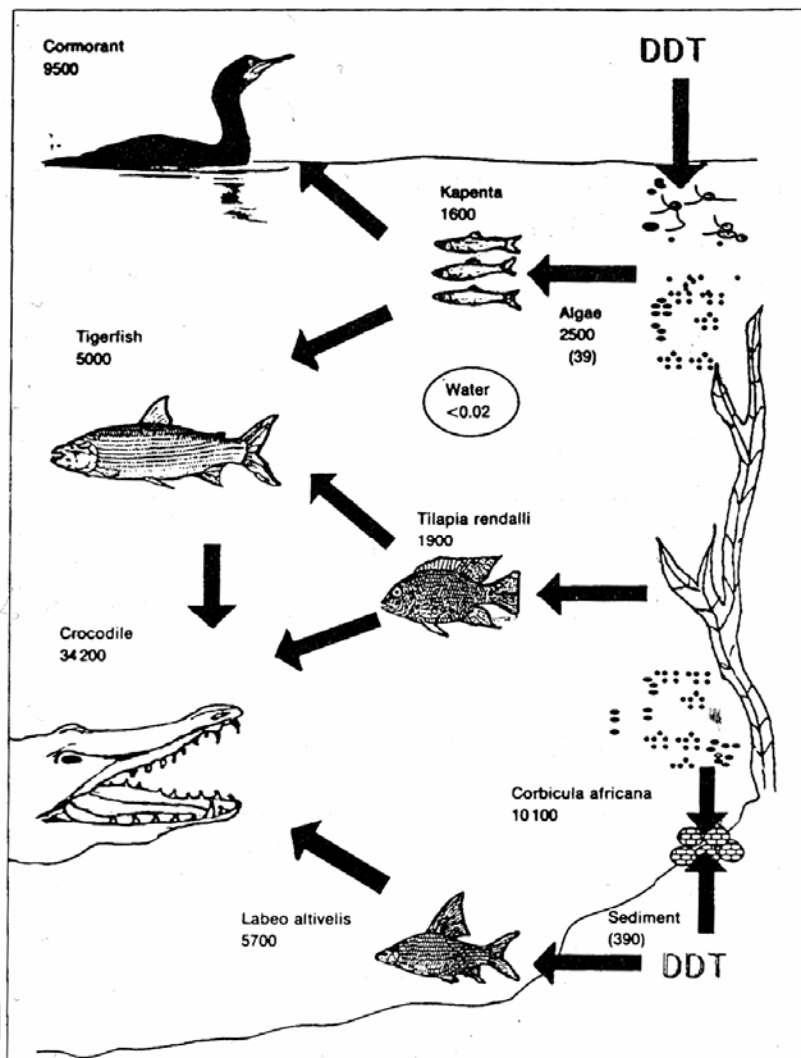
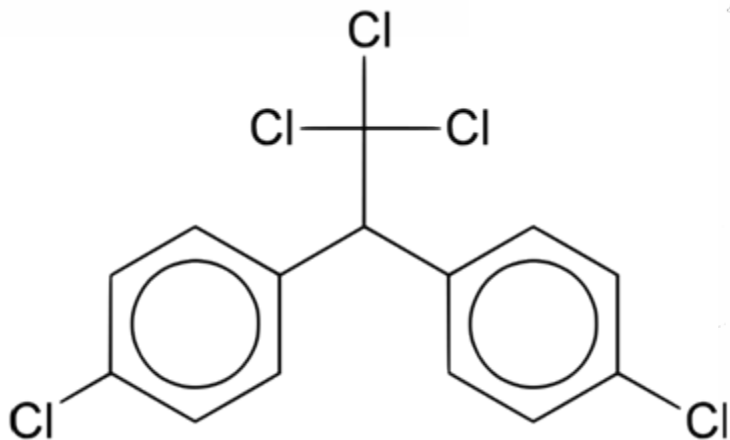
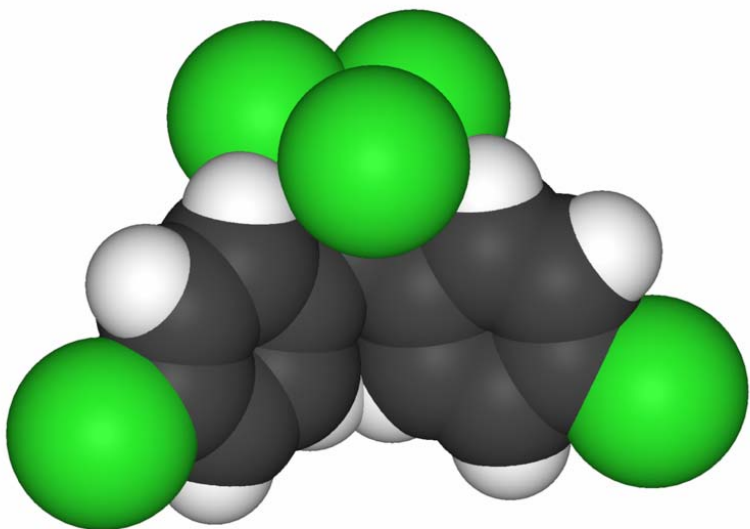
DDT (dichlor-difenyl-trichlorethan) 1,1,1-trichloro-2,2-bis(p-chlorofenyl) ethan

Mnoho problémů od zvýšení počtu sebevražd až po rakovinu.

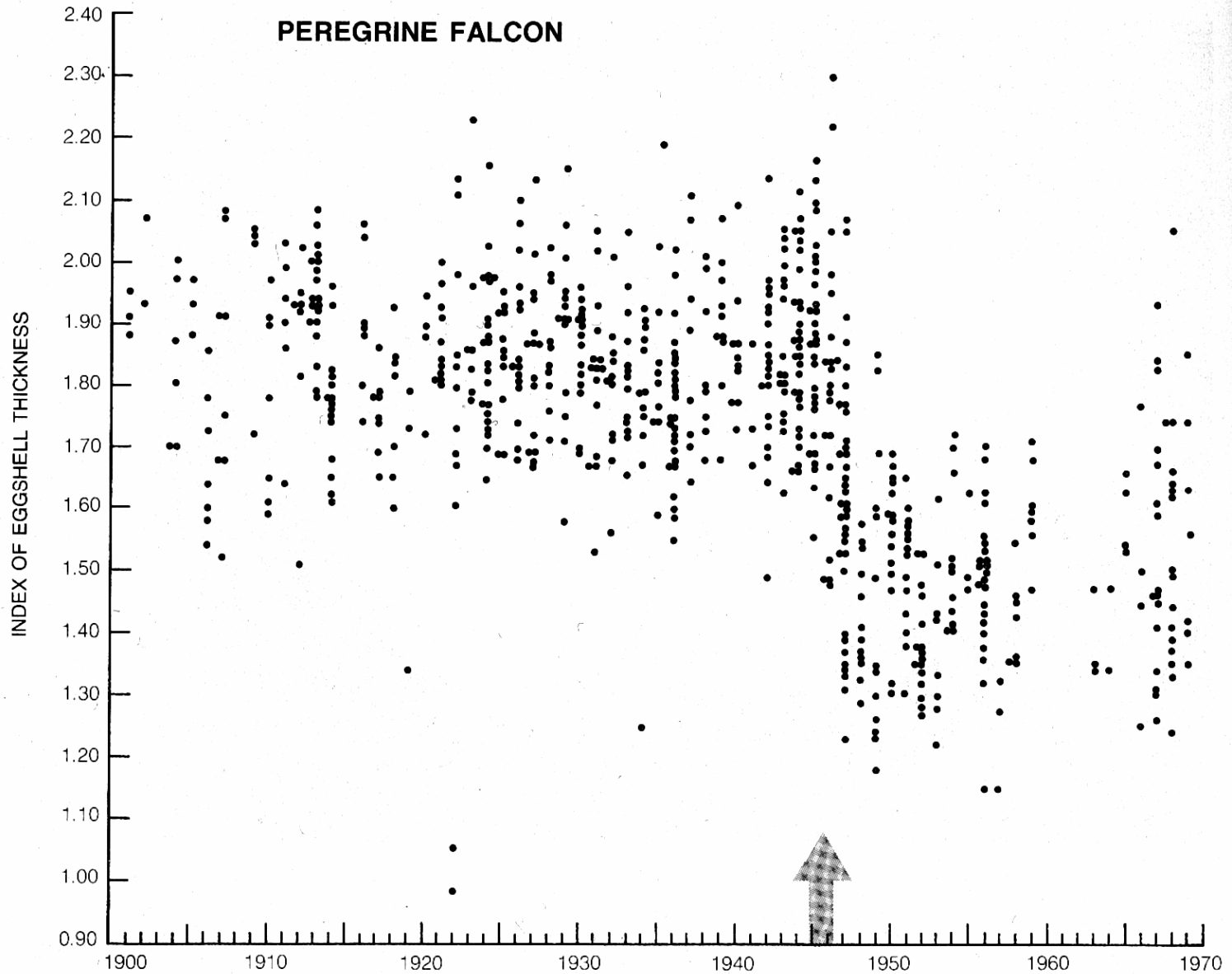
Pomalou se odbourává – za 15 let 40 % původního množství.

Biokoncentrace: 0,39 ppm v sedimentech → 9,5 ppm kormoráni, 34,5 ppm krokodýlové.

Stále se používá a rozvojových zemích.

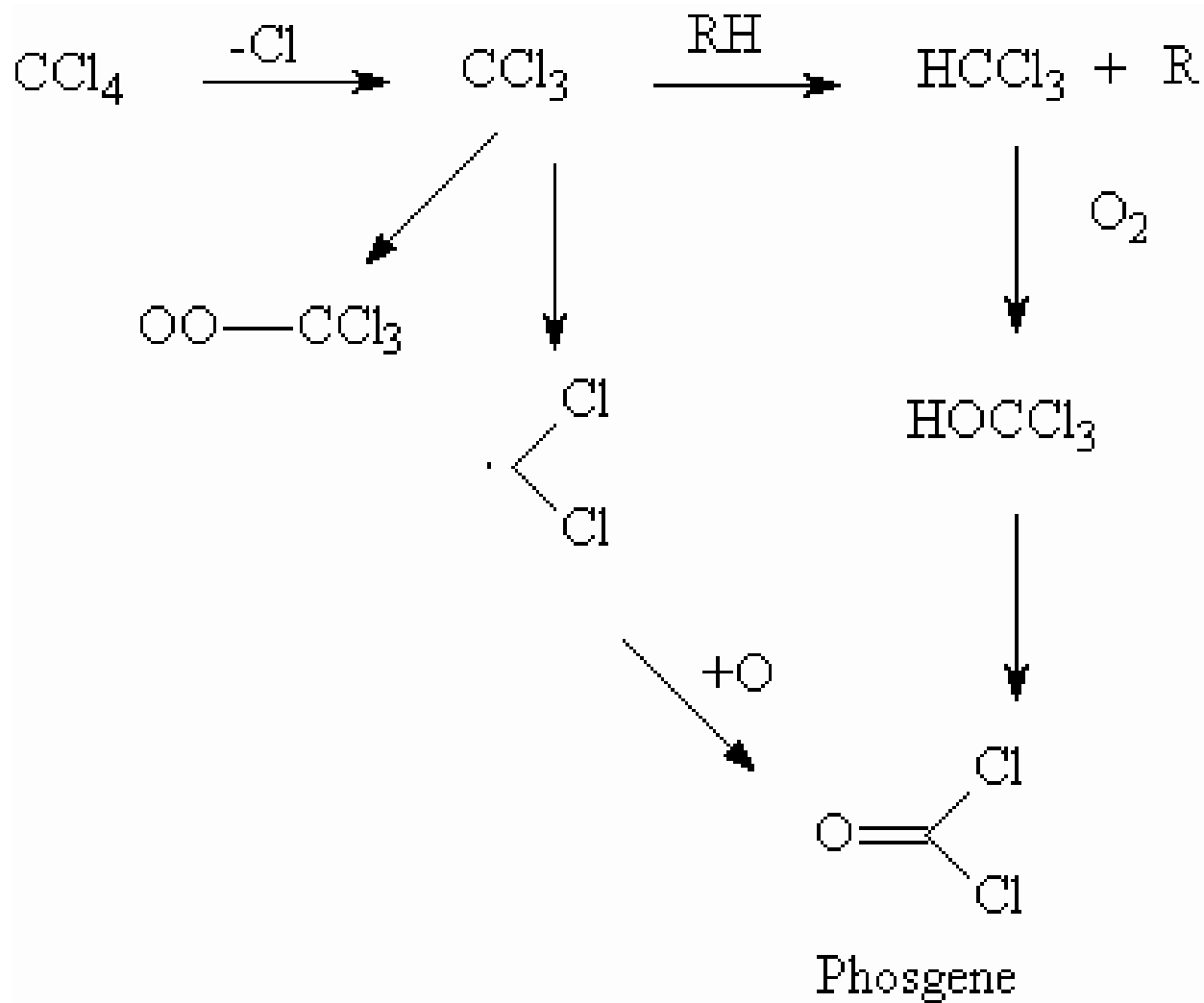


Síla skořápek vajíček jestřábů



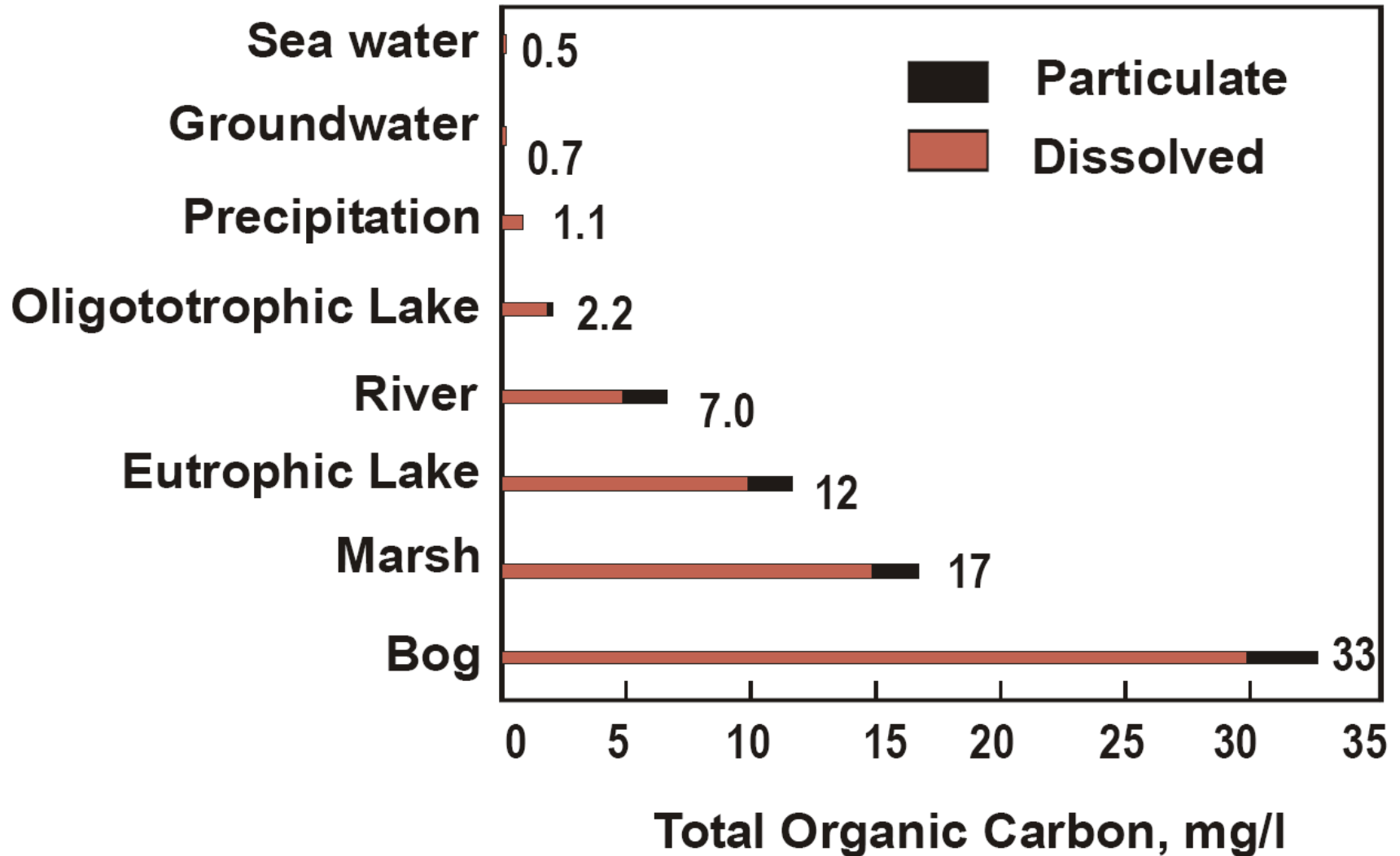
Chlorované uhlovodíky

Karcinogenita souvisí s meziprodukty rozpadu: radikály, fosgen (reakce s DNA vede k rakovině)



Organické látky

Zastoupení organických látek v přírodních vodách



Organické látky

Zastoupení organických látek v přírodních vodách

