**Modelling and Interpretation of Environmental Data**

**Cvičení #5**

Hodnocení perzistence organických polutantů:

Degradace ve vzduchu a celková perzistence

**V tomto cvičení budete potřebovat**

* **Tabulku 1 ze cvičení č. 4**
* **Výsledky úkolu 1 ze cvičení č. 4**
* **Model level II ze cvičení č. 3 a 4**

**Úkol 1.** Použijte AOPWIN k odhadu rychlostních konstant druhého řádu pro reakci s OH radikály pro 7 chemických látek z Tabulky 1 cvičení 4/1. Přepočítejte rychlostní konstanty 2. řádu na 1. řádu (*k*OH) vynásobením průměrnou koncentrací OH radiákálů 7.5·105 molekul/cm3. Vypočítejte odpovídající poločasy života.

**Úkol 2.** Pokud vezmete v úvahu chemickou strukturu 7 sloučenin, jaké trendy v *T0.5* pozorujete pro jejich reakce s OH radikály?

**Úkol 3. *V tomto úkolu pracujte pouze s chemickými látkami cyclohexan, 1,4-dichlorobenzen a octa-BDE z Tabulky 1.***

**Úkol 3.1.**Vypočítejte frakce vázané na atmosférických částicích φ pro tyto sloučeniny použitím vzorce *K*PA = 0.13·*K*OA a objemové koncentraci částic *V*PA = 2·10–11. Jak hodnoty φ závisí na **teplotě** a **koncentraci částic** ve vzduchu?

**Úkol 3.2.** Použijte výsledky z modelů AOPWIN a BIOWIN3 pro poločasy života ve vzduchu, vodě a půdě (pro BIOWIN, předpokládejme stejné poločasy ve vodě a půdě), a rozdělovací koeficienty z Tabulky1 jako vstupní parametry do Boxového modelu (Cvičení 3 & 4, nastavení modelu pro Švýcarsko zůstávají stejné) k odhadu celkové perzistence *P*ov, s použitím emise 100 mol/h. Jaké *P*ov získáte, když zvýšíte emisní tok na 200 mol/h?

**Úkol 3.3.**Změňte rychlostní konstantu *k*OH (výsledek AOPWIN) na *k*OH·(1 – φ). To znamená, že předpokládáme, že frakce vázaná na částice nereaguje s OH radikály. Vypočítejte nové poločasy života a znovu je použijte do modelu Level II. Jaký to bude mít vliv na celkovou perzistenci těchto tří chemických látek?