

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 radiálů $7.5 \cdot 10^5$ molekul/cm³. Vypočítejte odpovídající poločasy života.

Úkol 2. Pokud vezmete v úvahu chemickou strukturu 7 sloučenin, jaké trendy v $T_{0.5}$ 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 $K_{PA} = 0.13 \cdot K_{OA}$ a objemové koncentraci částic $V_{PA} = 2 \cdot 10^{-11}$. 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 Tabulky 1 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 $k_{OH} \cdot (1 - \phi)$. 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?