

Vstupní data

Chemické vlastnosti

	TFP	a-HCH	PCB-180
log Kaw	1.80	-3.52	-2.51
log Kow	2.10	3.94	7.66
log Koa	0.30	7.46	10.17
poločas života ve vzduchu (h)	260	1418	1200
poločas života ve vodě (h)	1000	2920	55000
poločas života v půdě (h)	1000	14000	1000000

Emise

TFP	
MW	114 g/mol
Emise do vzduchu	450 kg/y
	mol/h
a-HCH	
MW	290.93 g/mol
Emise do vody	10 kg/y
	mol/h
PCB-180	
MW	395 g/mol
Emise do vzduchu	9 kg/y
	mol/h

1. Chemické vlastnosti

Název chemické látky	Cname	
Log Kaw	LKAW	
Log Kow	LKOW	
Log Koa	LKOA	
poločas života ve vzduchu (h)	ThA	
poločas života ve vodě (h)	ThW	

2. Vstupní vlastnosti

2.1 Vlastnosti prostředí

Teplota (°C)	TC	10
Termodynamická teplota (K)	TK	283.15
Celkový povrch (m ²)	A	4.13E+10
Frakce povrchu pokrytá vodou	FAW	0.05
Výška vzduchu (m)	HA	1000
Hloubka vody (m)	HW	30
Objem vzduchu (m ³)	VA	2.06E+12
Objem vody (m ³)	VW	6.19E+10

2.2 Vlastnosti sub-kompartmentů

Hustota částic ve vodě (kg/m ³)	rhoP	2500
Frakce OC v částicích ve vodě	FOCP	0.2
Objemová frakce tuhých částic ve vzduchu	VQA	1.50E-11
Objemová frakce tuhých částic ve vodě	VPW	5.00E-06
Vymývací poměr	Scav	5.00E+04

2.3 Mezifázové Mass Transfer Coefficients (m/h)

Air side air-water MTC	MTCawa	2
Water side air-water MTC	MTCaww	0.02
Rychlost srážek (m ³ /(m ² h))	MTCrain	9.70E-05
Rychlost depozice tuhých částic ve vzduchu	MTCQd	10
Rychlost depozice suspendovaných částic ve	MTCdep	4.00E-08

2.4 Advektivní procesy

Tok vzduchu (m ³ /s)	GA	
Tok vzduchu (m ³ /h)	GA	
Tok vody (m ³ /s)	GW	
Tok vody (m ³ /h)	GW	

3.1 Bezrozměrné rozdělovací koeficienty

Kaw

Kow

Koa

K (suspendovaný sediment:voda)

K (tuhé částice: vzduch)

Kaw

Kow

Koa

Kssw

Kqa

3.2 Fugacitní kapacity sub-kompartmentů (mol/(Pa m³))

Z čistý vzduch

Z čistá voda

Z tuhé částice ve vzduchu

Z tuhé částice ve vodě

Zpa

Zpw

Zpq

Zpss

3.3 Fugacitní kapacity kompartmentů (mol/(Pa m³))

Z bulk vzduch

Z bulk voda

ZA

ZW

3.4 rychlostní konstanty degradace (h⁻¹)

Rychlostní konstanta prvního řádu degradace pro vzduch

Rychlostní konstanta prvního řádu degradace pro vodu

KdegA

KdegW

4. Kinetické koeficienty

4.1 Difuzní D koeficienty v čistých fázích (mol/(Pa h))

D air side fázového rozhraní vzduch-voda	Dawa	<input type="text"/>
D water side fázového rozhraní vzduch-voda	Daww	<input type="text"/>

4.2 D koeficienty výměny mezi "Bulk" fázemi kompartmentů (mol/(Pa h))

D difuze vzduch-voda	Daw1	<input type="text"/>
D vzduch-voda suchá depozice tuhých částic	Daw2	<input type="text"/>
D vzduch-voda mokré depozice plynu	Daw3	<input type="text"/>
D vzduch-voda mokré depozice tuhých částic	Daw4	<input type="text"/>
D difuze voda-vzduch	Dwa1	<input type="text"/>

4.3 Celkové D koeficienty transportu mezi "Bulk" kompartmenty (mol/(Pa h))

Celkový D vzduch-voda	DAW	<input type="text"/>
Celkový D voda-vzduch	DWA	<input type="text"/>

4.4 D koeficienty advektivních procesů (mol/(Pa h))

D advekce vzduchu	DadvA	<input type="text"/>
D advekce vody	DadvW	<input type="text"/>
D depozice suspendovaných částic ve vodě	Dsdep	<input type="text"/>

4.5 D degradace (mol/(Pa h))

D degradace ve vzduchu	DdegA	<input type="text"/>
D degradace ve vodě	DdegW	<input type="text"/>

4.6 D koeficienty nevratných procesů (mol/(Pa h))

D ztrát ze vzduchu	DsinkA	<input type="text"/>
D ztrát z vody	DsinkW	<input type="text"/>

4.7 D koeficienty ztrát z kompartmentu (mol/(Pa h))

Celkový D pro vzduch	DTA	<input type="text"/>
Celkový D pro vodu	DTW	<input type="text"/>

5. Emisní tok (mol/h)

Emise do vzduchu

EA

Emise do vody

EW

6. Level III hmotnostní bilanční rovnice

6.1 Řešení dosazováním

Fugacita ve vzduchu (Pa)

fa

Fugacita ve vodě (Pa)

fw

6.2 Solved through matrix inversion

Kompartment	Matice D-koefficientů		Emise*-1
	Vzduch	Voda	
Vzduch	(-DTA)	DWA	(-EA)
Voda	DAW	(-DTW)	(-EW)

7. Výsledná distribuce v ustáleném stavu (Level III)

Zásoby ve vzduchu (mol)

IA

frakce %	

Zásoby ve vodě (mol)

IW

Celková zásoba (mol)

IT

$$\text{Fugacita} = -D^{-1} * E$$

#HODNOTA!

#HODNOTA!