

# Modelling and Interpretation of Environmental Data





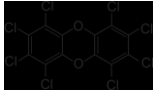
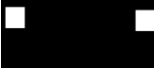
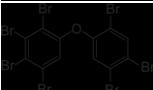
## Cvičení #5

### Biodegradace organických polutantů

Na počítači naistalujte program EPI Suite z webových stránek US EPA:

<https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suite-estimation-program-interface>

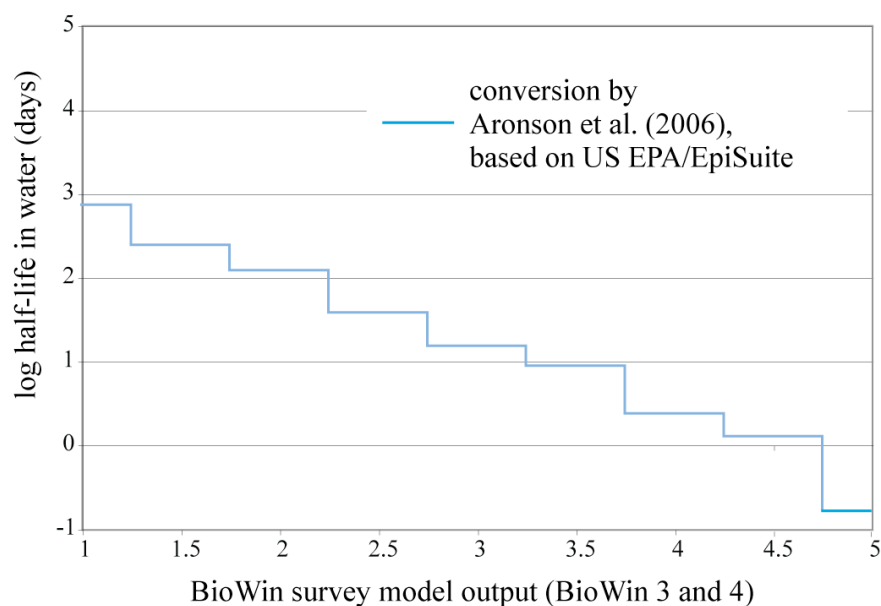
Použijte modul BIOWIN na odhad biodegradace následujících 7 sloučenin (můžete použít jejich CAS čísla jako vstupní identifikátor).

<b>Tabulka 1. CAS čísla a rozdělovací koeficienty</b>				
<b>sloučenina</b>		<b>CAS no.</b>	<b>log K<sub>AW</sub></b>	<b>log K<sub>OW</sub></b>
<i>n</i> -hexan		110-54-3	1.87	3.90
cyclohexan		110-82-7	0.79	3.44
<i>p</i> -xylene		106-42-3	-0.55	3.15
1,4-dichlorobenzen		106-46-7	-1.01	3.44
octachlorodibenzo- <i>p</i> -dioxin (OCDD)		3268-87-9	-3.06	7.57
2,2',3,3',4,5,5',6'-octachlorobiphenyl (PCB 199)		52663-75-9	-3.39	8.91
octabromodiphenylether (octa-BDE)		32536-52-0	-4.60	10.17

**Úkol 1:** Převed'te score BIOWIN3 a BIOWIN4 na poločasy života použitím krokové funkce z Obrázku č.1. Numerické hodnoty krokové funkce jsou v Tabulce č.2. (viz. Aronson *et al.* (2006): Table 4, right column, revised values).

Zobrazte do grafu 14 bodů (sedm pro BIOWIN3 score a jejich odpovídající log  $t_{1/2}$ ; sedm pro BIOWIN4 score a jejich odpovídající log  $t_{1/2}$ ) společně s regresní přímkou:

$\log_{10}(t_{1/2}) = -0.8 \cdot \text{score} + 3.51$  (viz. Stempel *et al.* 2012).



**Obrázek 1.** Konverze BIOWIN scores na poločasy života pro aerobickou degradaci ve vodě.

**Tabulka 2.** Konverze BIOWIN scores na poločasy života pro aerobickou degradaci ve vodě. (Aronson *et al.* (2006)).

Descriptor	BIOWIN output (score)	half-life (days)
Hours	>4.75	0.17
Hours-days	4.25-4.75	1.25
Days	3.75-4.25	2.33
Days-weeks	3.25-3.75	8.67
Weeks	2.75-3.25	15
Weeks-months	2.25-2.75	37.5
Months	1.75-2.25	120
Recalcitrant	<1.75	180
-	1.25-1.75	240
-	<1.25	720

**Úkol 2:** Podívejte se na strukturální vzorce chemických látek v Tab. 2, jakou pozorujete závislost mezi jejich strukturou a poločasy života pro biodegradaci? Jaké trendy pozorujete?

**Úkol 3:** Pro OCDD a octa-BDE, použijte detailní výstup modelu BIOWIN a identifikujte molekulární fragmenty, které mají významný vliv na výsledky BIOWIN 3&4. Vypište číselné hodnoty příspěvků fragmentů pro tyto dvě sloučeniny.

**Úkol 4:** Porovnejte příspěvky relevantních fragmentů pro biodegradaci OCDD a octa-BDE s příspěvky ostatních fragmentů, které model využívá (Tab.3) (viz. Boethling *et al.* (1994), Table 1 in the columns “survey model – primary coeff” and “survey model – ultimate coeff”). Jsou příspěvky pro OCDD a octa-BDE relativně vysoké, nebo malé?

**Tabulka 3.** Koeficienty BOWIN modelu dle Boethling *et al.* (1994).

	<b>primary coeff</b>	<b>ultimate coeff</b>
polycyclic aromatic hydrocarbon ( $\geq 4$ rings)	-0.702	-0.799
unsubstituted aromatic ( $\leq 3$ rings)	-0.343	-0.586
tertiary amine	-0.288	-0.255
trifluoromethyl (CF <sub>3</sub> )	-0.274	-0.513
aromatic Cl	-0.165	-0.207
aromatic Br	-0.154	-0.136
carbon with 4 single bonds and no H	-0.153	-0.212
aromatic I	-0.127	-0.045
aromatic NO <sub>2</sub>	-0.108	-0.17
aromatic NH <sub>2</sub> or NH	-0.108	-0.135
aliphatic Cl	-0.101	-0.173
alkyl substituent on aromatic ring	-0.069	-0.075
cyanide/nitrile (C $\equiv$ N)	-0.065	-0.082
triazine ring	-0.058	-0.246
azo group (N=N)	-0.053	-0.3
ketone (CC(=O)C)	-0.022	-0.023
pyridine ring	-0.019	-0.214
aliphatic ether	-0.0097	-0.0087
molecular weight	-0.00144	-0.00221
unsubstituted phenyl group (C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> )	0.0049	0.022
aromatic (C(=O)OH)	0.0078	0.088
N-nitroso (NN=O)	0.019	-0.385
aromatic sulfonic acid or salt	0.022	0.142
aliphatic Br	0.035	0.029
aromatic OH	0.04	0.056
aliphatic NH <sub>2</sub> or NH	0.043	0.024
aromatic ether	0.077	-0.058
aliphatic OH	0.129	0.16
aromatic F	0.135	-0.407
aliphatic sulfonic acid or salt	0.177	0.193
carbamate	0.194	-0.047
aldehyde (CHO)	0.197	0.022
amide (C(=O)N or C(=S)N)	0.205	-0.054
ester (C(=O)OC)	0.229	0.14
linear C <sub>4</sub> terminal alkyl (CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> )	0.269	0.298
aliphatic (C(=O)OH)	0.386	0.365
phosphate ester	0.465	0.154
equation constant	3.848	3.199

## Literatura

Aronson, D., Boethling, R.S., Howard, P., Stiteler, W. (2006) Estimating biodegradation half-lives for use in chemical screening, *Chemosphere* **63**, 1953–1969.

Boethling, R.S., Howard, P.H., Meylan, W., Stiteler, W., Beauman, J., Tirado, N. (1994) Group contribution method for predicting probability and rate of aerobic biodegradation, *Environ. Sci. Technol.* **28**, 459–465.

Stempel, S., Scheringer, M., Ng, C.A., Hungerbühler, K. (2012) Screening for PBT chemicals among the “existing” and “new” chemicals of the EU, *Environmental Science & Technology* **46**, 5680–5687.