

Modelling and Interpretation of Environmental Data

Cvičení #2

Rovnovážná distribuce polutantů v životním prostředí

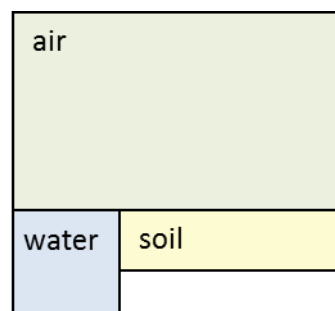
Boxový model Level-I

Při hledání toho, jaký je osud chemické látky v životním prostředí je často vhodné pokusit se nejprve vyzkoušet, jak se chovají v hypotetickém, zjednodušeném prostoru, který má některé důležité vlastnosti skutečného prostředí. Takové prostředí se nazývá “unit world”, často také “boxový model”.

V tomto cvičení budeme počítat, jak se různé chemické látky rozdělují mezi vzduch, vodu a půdu za podmínek termodynamické rovnováhy v uzavřeném systému boxového modelu.

Předpokládejme, že se jedná o prostředí velikosti Švýcarska 41 280 km². Pro zjednodušení předpokládejme, že ve vzduchu nejsou aerosoly ani suspendované částice ve vodě a půda má pouze tuhou složku.

Výška vzduchové vrstvy je 1000 m a voda pokrývá 5% plochy s průměrnou hloubkou 30m. Zbytek povrchu je pokryt půdou o hloubce 10 cm s hmotnostním obsahem organického uhlíku 4%. Předpokládejme konstantní teplotu 10°C a hustotu půdy 2500 kg/m³.



Vypočítejte rozdělení 10 kg 2,3,3,3-tetrafluoropropenu (TFP), α -hexachloro-cyklohexanu (α -HCH) a PCB-180 mezi vzduch, vodu a půdu v tomto boxovém modelu použitím “**level-I fugacity calculation**”. Použijte rozdělovací koeficienty uvedené v tabulce.

Vypočítejte procentuální rozdělení látek mezi vzduch, vodu a půdu za podmínek rovnovážného dělení pomocí kalkulačky, nebo MS Excel. Výsledky prezentujte ve formě tabulky. Diskutujte rozdíly výsledků mezi sloučeninami a identifikujte média, ve kterých se bude polutant akumulovat.

	2,3,3,3-tetrafluoropropene	α -hexachloro-cyclohexane	2,2',3,4,4',5,5'-heptachlorobiphenyl
	TFP	α-HCH	PCB-180
log K_{aw}	1.80	-3.52	-2.51

$\log K_{ow}$	2.10	3.94	7.66
$\log K_{oa}$	0.30	7.46	10.17

Prezentace výsledku:

Tabulka

	TFP	a-HCH	PCB 180
rovnovážná frakce ve vzduchu (%)			
rovnovážná frakce ve vodě (%)			
rovnovážná frakce v půdě (%)			