

Modelling and Interpretation of Environmental Data

Cvičení #1

Termodynamická rovnováha a osud chemických látek v prostředí

V této lekci uvedeme problematiku rozdělovacích koeficientů a jejich vztah k rozpustnostem. Mějte na paměti, že rozdělovací koeficient mezi fázemi i a j (K_{ij}), za podmínek TD rovnováhy lze vyjádřit jako poměr rozpustností v každé fázi ($K_{ij} = S_i/S_j$). Uvědomte si také, že tlak nasycených par (tj. “rozpustnost” ve vzduchu) a rozpustnost ve vodě se mohou měnit pro různé chemické látky v rozsahu několika řádů, zároveň ale rozpustnost v oktanolu je obvykle stejná kolem 1000 mol/m^3 (pro neutrální organické látky).

Během celého kurzu budeme používat chemické vlastnosti látek, rychlostní koeficienty transportních a transformačních procesů ke zjišťování toho, jak se chemické látky distribuují v životním prostředí. V průběhu cvičení budeme používat tři vzorové chemické látky a zjišťovat jejich osud v životním prostředí během zavádění popisu nových procesů v našich environmentálních modelech.

Jedná se o tyto chemické látky:

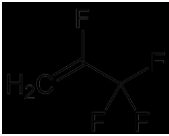
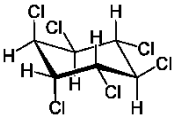
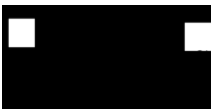
2,3,3,3-tetrafluoropropene (TFP),

alfa-hexachlorocyclohexan (α -HCH),

2,2',3,4,4',5,5'-heptachlorobiphenyl (PCB-180),

Použijte znalosti o rozdělovacích koeficientech a jejich vztahů k rozpustnostem z úvodní lekce ke zjištění toho, jak se rozdělí $1 \mu\text{g}$ každé látky v uzavřeném systému, který se sestává z 1 m^3 vody a 1 m^3 vzduchu za standardní teploty (20°C) a tlaku (1013 mbar).

Table 1.1: Rozdělovací vlastnosti tří vzorových látek

2,3,3,3-tetrafluoro- propene (TFP) $C_3H_2F_4$ CAS No. 754-12-1		MW = 114 g/mol	$\log K_{AW} = 1.8$	$\log K_{OW} = 2.1$
alpha- hexachlorocyclohexane $C_6H_6Cl_6$ CAS No. 319-84-6		MW = 290.83 g/mol	$P_L = 6.34 \times 10^{-4}$ mm Hg	$\log K_{OW} = 3.94$
2,2',3,4,4',5,5'- heptachlorobiphenyl (PCB-180) $C_{12}H_3Cl_7$ CAS No. 35065-29-3		MW = 395.33 g/mol	$\log K_{OA} =$ 10.17	$S_w = 2.18 \times 10^{-5}$ mol/m ³

TIP: Jednu informaci můžete použít pro zjištění vlastností jedné, nebo více látek. Příklad byste měli být schopni vyřešit na základě poznámek z první lekce!

Vtvořte v Excelu podobnou tabulku, která bude obsahovat vaše průběžné výpočty a výsledky:

	2,3,3,3- tetrafluoropropene TFP	alpha- hexachlorocyclohexane α-HCH	2,2',3,4,4',5,5'- heptachlorobiphenyl PCB-180
log Kaw			
log Kow			
log Koa			
frakce ve vzduchu (%)			
frakce ve vodě (%)			