



CHEMIE ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ I

Environmentální procesy

(11)

Environmentální biotické rovnováhy

Ivan Holoubek

RECETOX, Masaryk University, Brno, CR

holoubek@recetox.muni.cz; <http://recetox.muni.cz>

(11) Environmentální biotické rovnováhy

Biotické environmentální rovnováhy.

Bioakumulace.

Bioobohacování, příjem potravou, příjem ze sedimentů,
kombinovaný příjem z vody, potravy a sedimentů.

Akumulace v terestrických rostlinách, příjem kořeny, foliární
příjem.

Akumulace v terestrických bezobratlých.

Definice, základní pojmy

Bioakumulace

Bioakumulace (bioaccumulation) – je proces, během kterého jsou chemické látky **akumulovány** organismy přímo z okolního média (biokoncentrace) nebo/a prostřednictvím potravy kontaminované těmito sloučeninami (bioobohacování).

Bioakumulace = biokoncentrace + bioobohacování

Bioakumulace, biokoncentrace i bioobohacování, tedy procesy vedoucí k nahromadění látky v organismu jsou **výsledkem procesu daného příjmu a eliminace látky.**

Bioakumulace

Bioakumulace, biokoncentrace, bioobohacování

Chemické látky mohou kontaminovat biotu různými cestami – z ovzduší, vody, sedimentů, půd a tento proces závisí na environmentálních a fyziologických faktorech.

Možnosti kontaminace:

- ↪ savci – z ovzduší
- ↪ ryby – z vody (kontaminace vody přímo vypouštěním, nepřímo z ovzduší, půd či sedimentů)
- ↪ terestrické organismy – z půdy
- ↪ terestrické rostliny – ovzduší, půda
- ↪ akvatické rostliny – voda, sedimenty
- ↪ všichni konzumenti – prostřednictvím potravy

Bioakumulace

Bioakumulace ve vodním prostředí

Pro řadu vodních organismů je příjem z vody a eliminace do vody hlavním cestou příjmu chemických látek.

Biokoncentrace je výsledkem procesu příjmu látky z okolního prostředí, ve kterém organismus žije a eliminace látky.

Proces příjmu – existuje několik procesů vedoucích k příjmu chemické látky organismem.

Každý z nich zahrnuje přechod látky přes buněčnou membránu.

Bioakumulace

Hlavní proces pro většinu organických látek a některé kovy a organokovové sloučeniny – pasivní difuze, dalšími procesy jsou filtrace, aktivní transport, difuze.

Řídící silou pro příjem je rozdíl fugacit mezi vodou a organismem.

Obvykle je pasivní difuze řízena koncentračním gradientem.

Výstižnější popis bioakumulace je pomocí fugacity.

Bioakumulace

Organismus obvykle má vyšší kapacitu pro ukládání xenobiotik na jednotku objemu než voda:

- ↪ některé kovy se váží na bílkoviny jako je metallothionein
- ↪ organické látky jsou ukládány v lipidech
- ↪ organokovy mohou být ukládány v lipidech nebo proteinech

Fugacity látky je poměr koncentrace k ukládací kapacitě.

Koncentrace látky ve vodě je obvykla malá - ukládací kapacita (rozpustnost) je malá, zatímco fugacita je relativně velká.

Bioakumulace

Koncentrace v organismu je na počátku procesu relativně malá, během procesu příjmu koncentrace v organismu narůstá, ale díky vysoké ukládací kapacitě fugacita látky v organismu je relativně nízká.

Látka je transportována z místa z vyšší fugacitou do místa z nižší fugacitou pasivní difuzí.

Kvantitativní popis však častěji využívá koncentrací než fugacit.

Bioakumulace

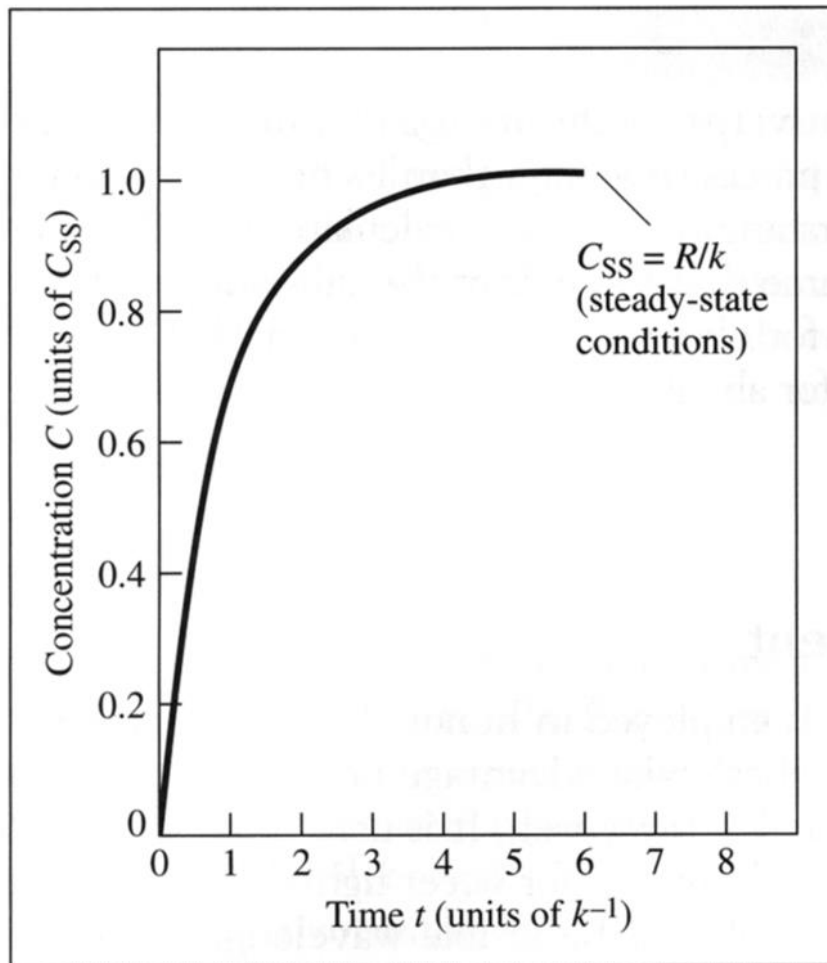
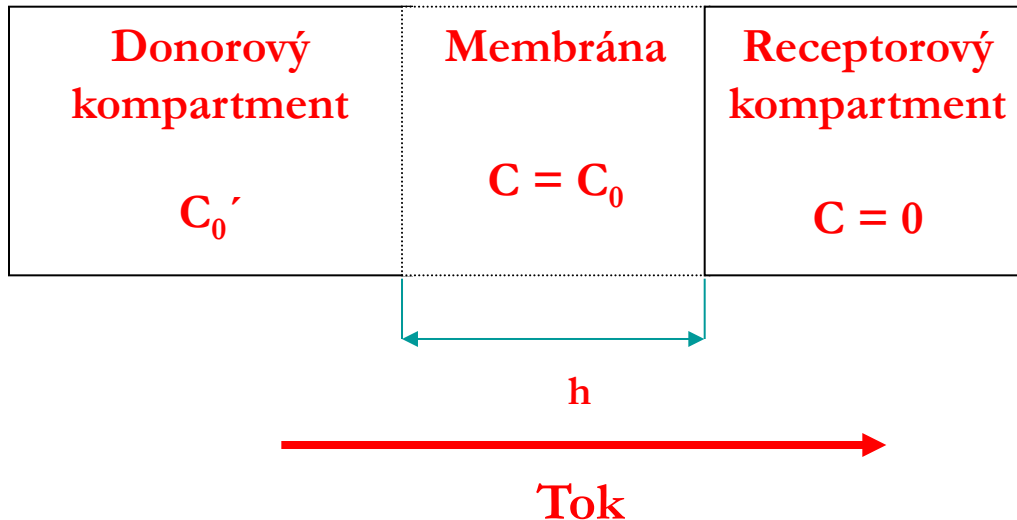


Figure 7-1
Increase in metal concentration with time to reach the steady-state value, C_{ss} .

Bioakumulace

Pasivní difuze

Jeden z nejdůležitějších příjmových mechanismů látek – přechod přes lipidní fázi membrán může definován **Fickovými zákony**



Bioakumulace

Je-li koncentrační gradient konstantní, rovnovážný tok F je dán vztahem:

$$F = (D * C_0) / h$$

Koeficient difuze

Síla membrány

Koncentrace na povrchu membrány z donorové strany

Na receptorové straně – účinná $C = 0$

$$C_0 = K * C_0'$$

Rozdělovací koeficient

Bioakumulace

C_0' je známa, pak:

$$F = (K * D * C_0') / h$$

Koeficient permeability
[cm.s⁻¹]

$$P = K * D$$

Je-li difuze látky 1. řádu, pak koncentrace C' v donorovém kompartmentu objemu V je dána vztahem:

$$C' = C_0' * e^{(D * K * t / h * V)}$$

Bioakumulace

Koeficient difuze může být vyjádřen jako funkce parametrů vyjadřujících vlastnosti difundující látky (poloměr molekuly r , molekulová hmotnost..):

$$D = \text{konst.} / r$$

$$D = \text{konst.} / (MH)^{1/2}$$

$$P = (K * \text{konst.}) / (MH)^{1/2}$$

- ↪ existuje přímý vztah mezi příjmem a rozdělovacím koeficientem
- ↪ hydrofóbnější látky mají vyšší tendenci k pohybu přes biologické membrány
- ↪ když je rychlost absorpce řízena rozdělovacím koeficientem látky, pak tendence kyselin či bazí je ovlivňována jejich pK a pH .

Bioakumulace

Proces eliminace

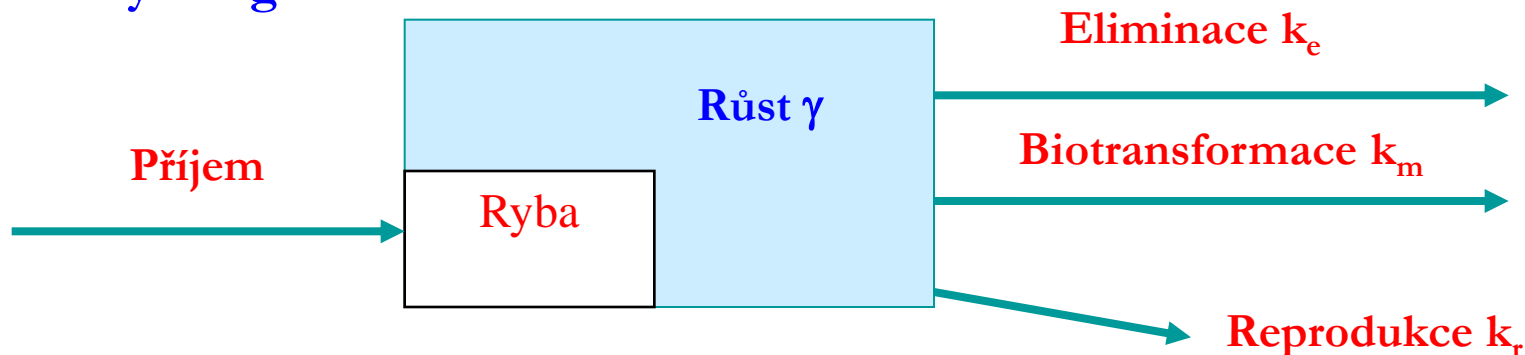
Analogicky procesu příjmu i proces eliminace látky z organismu je řízen převážně pasivní difuzí a aktivním transportem.

Většina hydrofóbních látek je pasivní difuzí vylučovány do vody nebo výkalů.

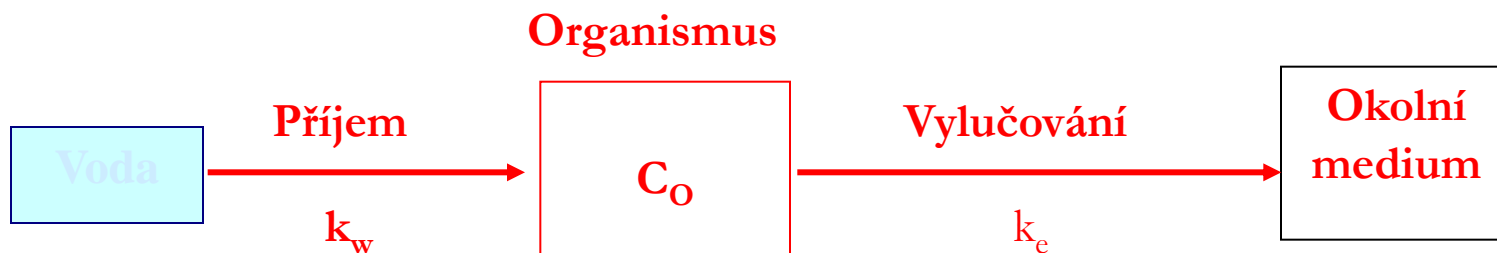
Koncentrace látky je rovněž zřed'ována procesem růstu organismu.

Další možný proces je kojením nebo transferem látky do vajíček.

Biotransformace, zvláště u hydrofilnějších látek je dalším procesem eliminace látky z organismu.



Bioakumulace



Rychlost změny (nárůst, pokles) látky ve vodním organismu v čase je dán vztahem:

$$dC_O / dt = k_w * C_w - k_e * C_O$$

Kde:

C_w – koncentrace látky ve vodě [mol.l⁻¹]

C_O – koncentrace látky v organismu [mol.kg⁻¹]

k_w - rychlostní konstanta příjmu [l.kg⁻¹.d⁻¹]

k_e - rychlostní konstanta eliminace [l.d⁻¹]

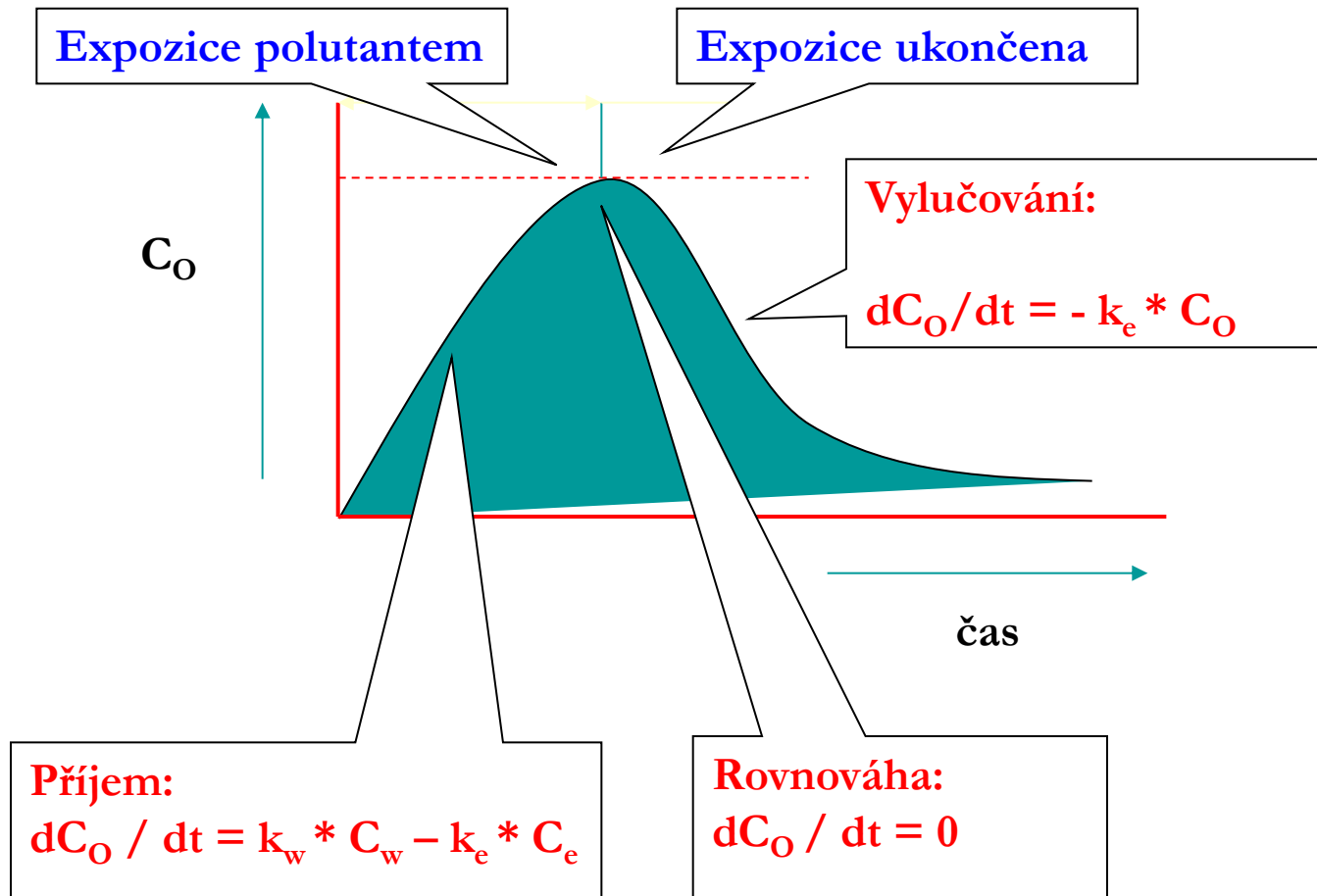
Bioakumulace

Konstanty k_w a k_e nezávisí na koncentraci látky ve vodě a organismu, ale závisí na organismu a vlastnostech látky.

Pokud je organismus kontinuálně exponován danou látkou (C_w je konstantní), integrací po počáteční podmínky $C_0 = 0$ a $t = 0$, pak C_0 v čase t :

$$C_0 = (C_w * k_w) * (1 - e^{-k_e * t}) / k_e$$

Příjem a vylučování látek vodním organismem



Bioakumulace

V rovnováze se tedy příjem rovná vylučování:

$$\begin{aligned}dC_O / dt = 0 &= k_w * C_w - k_e * C_O \\ K_w * C_w &= k_e * C_O\end{aligned}$$

Když je expozice polutantem ukončena pak:

$$K_w * C_w = 0$$

Pak vylučování:

$$dC_O / dt = - k_e * C_O = C_{O0} * e^{-k_e * t}$$

Bioakumulace

Biologický poločas života ($t_{1/2}$) v organismu – čas potřebný ke snížení koncentrace v organismu na polovinu:

$$t_{1/2} = 0,693 / k_e$$

Bioakumulační faktor (BCF) – v rovnováze (po nekonečně dlouhé expoziční době) pokud je $dC_O/dt = 0$ platí:

$$BCF = C_O / C_w = k_w / k_e$$

$$\log BCF = n * \log K_{OW} + b$$

Bioakumulace

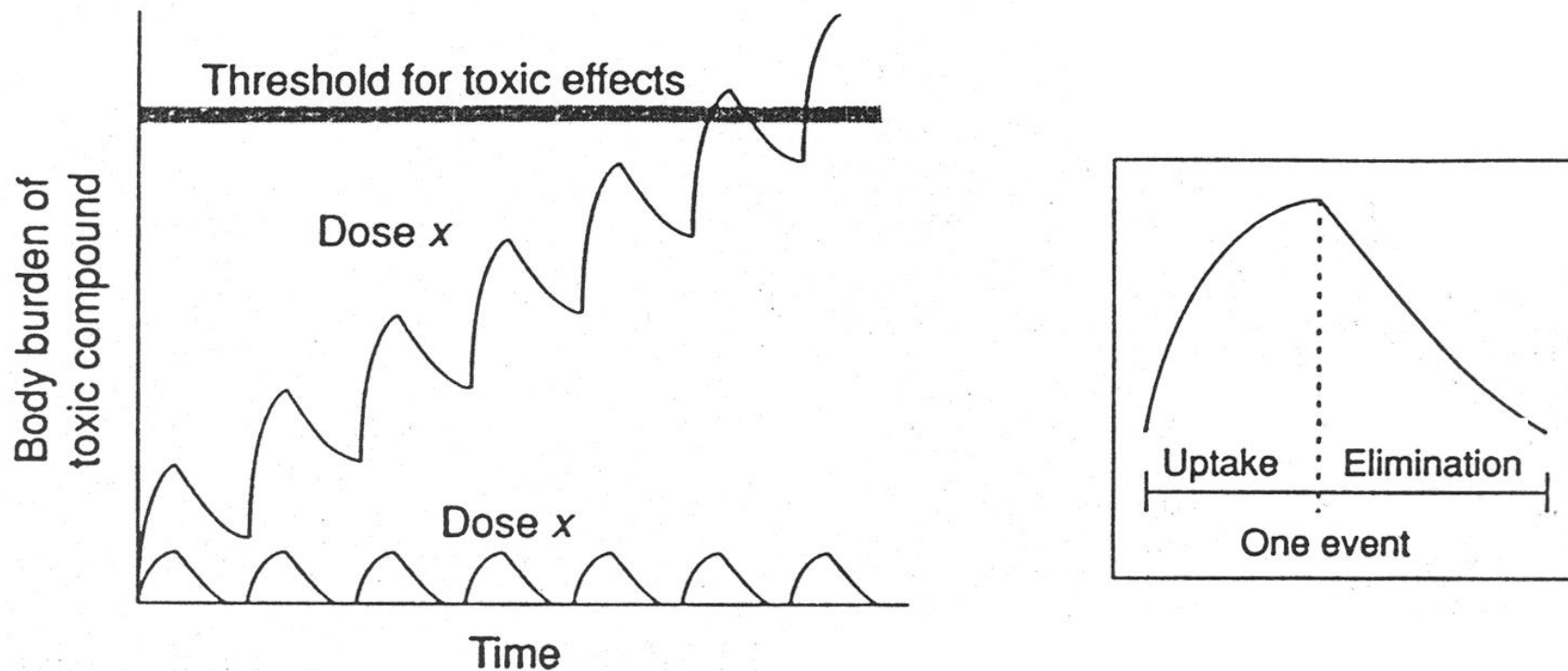


FIGURE 5-5

Effect of dose fractionalization on accumulation of a toxic compound.

Bioakumulace

Vztah mezi BCF a $\log K_{ow}$

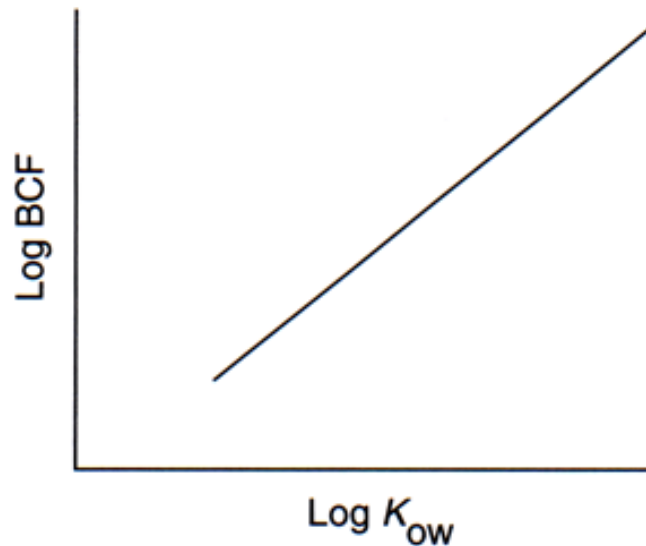


FIGURE 4.1 *Relationship of BCF to $\log K_{ow}$.*

Bioakumulace

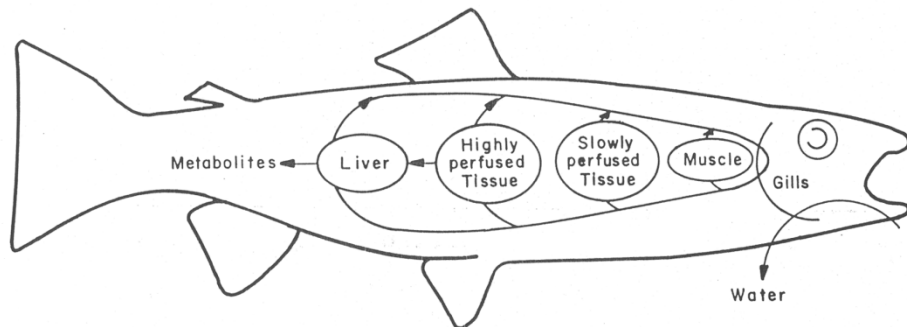
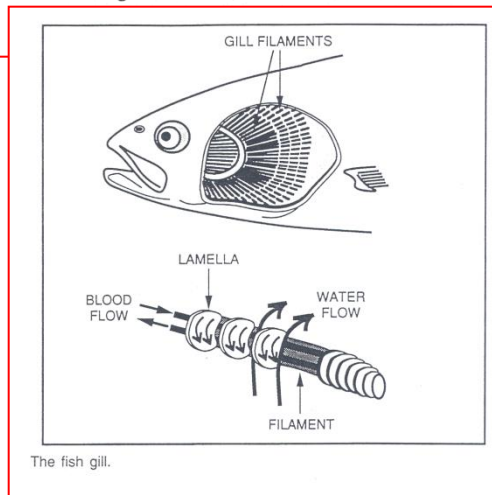
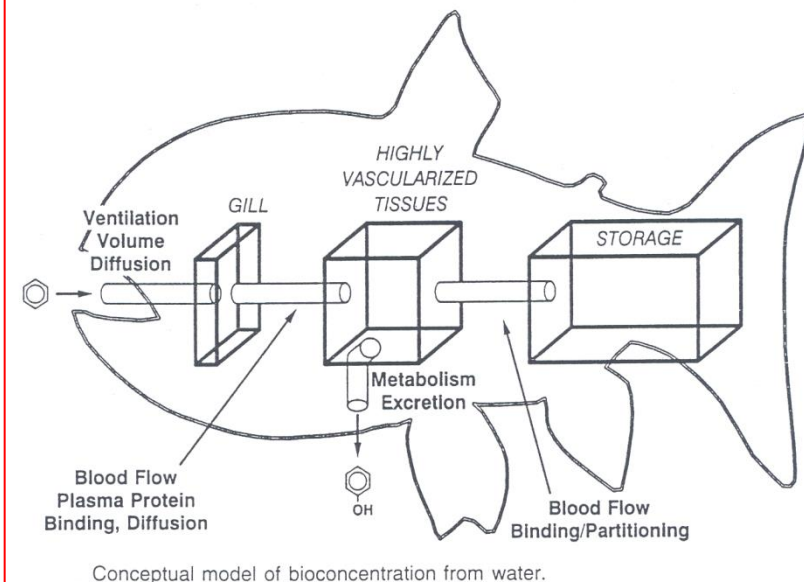


FIGURE 2-24 Schematic representation of a physiologically based kinetic model for bioaccumulation of a chemical that is absorbed through the gills, transported by blood flow, stored in various body tissues, and metabolized by the liver. Such a model requires much more detailed information on the fish than does a partitioning model; yet it may be necessary to use this more complex approach for chemicals that are metabolized or excreted by the fish more rapidly than they are exchanged with the water. (Barron, 1990.)



Bioobohacování

Pokud začíná být koncentrace látky vyšší v organismu než v jeho potravě, pokud je hlavní cestou příjmu potrava – dochází k bioobohacování.

Bioobohacování je významné pouze pro látky, které jsou ve vysokých koncentracích v potravě a velmi nízkých koncentracích v okolním prostředí (voda pro akvatické organismy, vzduch pro terestrické organismy, půda a sedimenty pro bentické a půdní organismy).

Bioobohacování

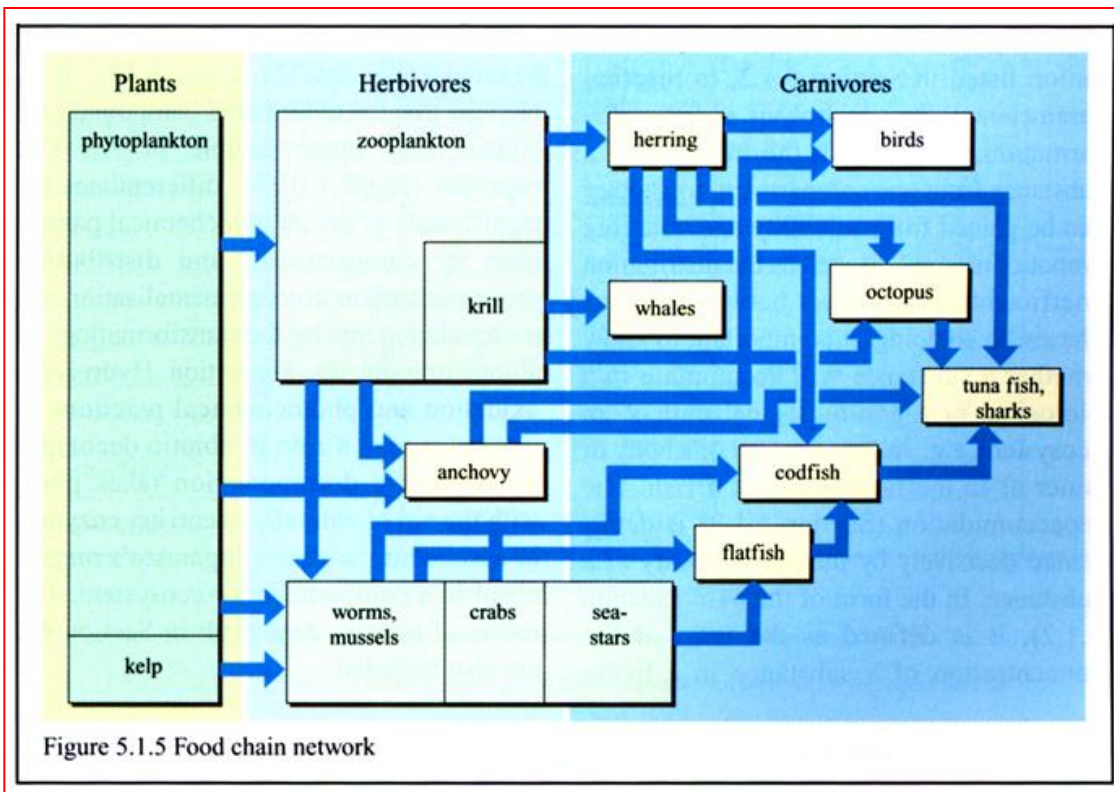
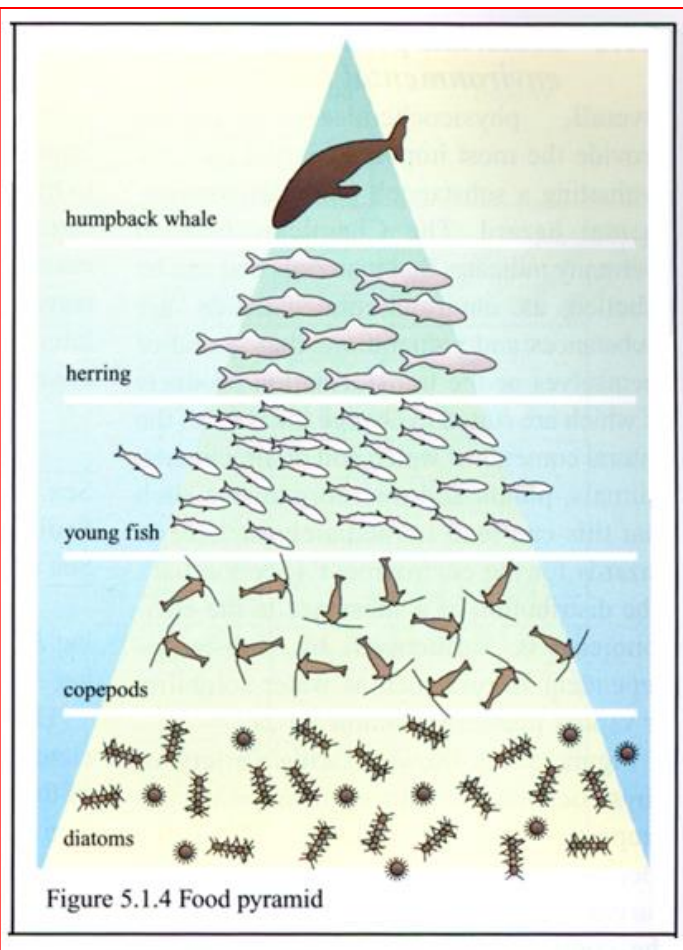
Příjem potravou

K příjmu potravou dochází **zažívacím traktem** (Gastro-Intestinal Tract, GIT).

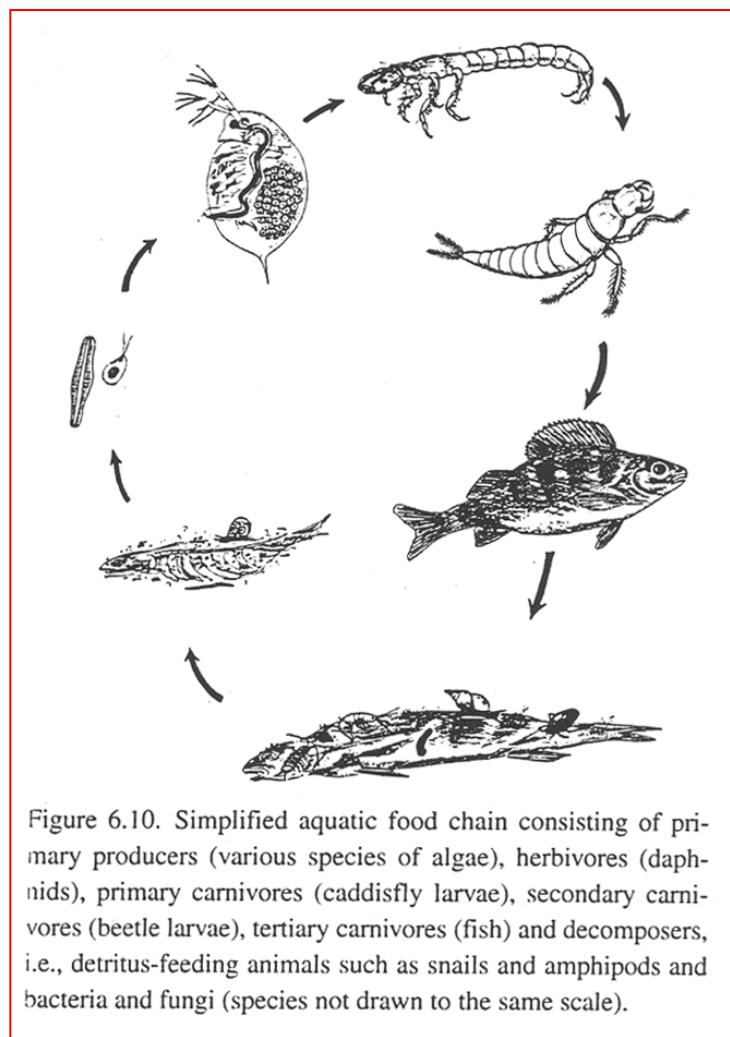
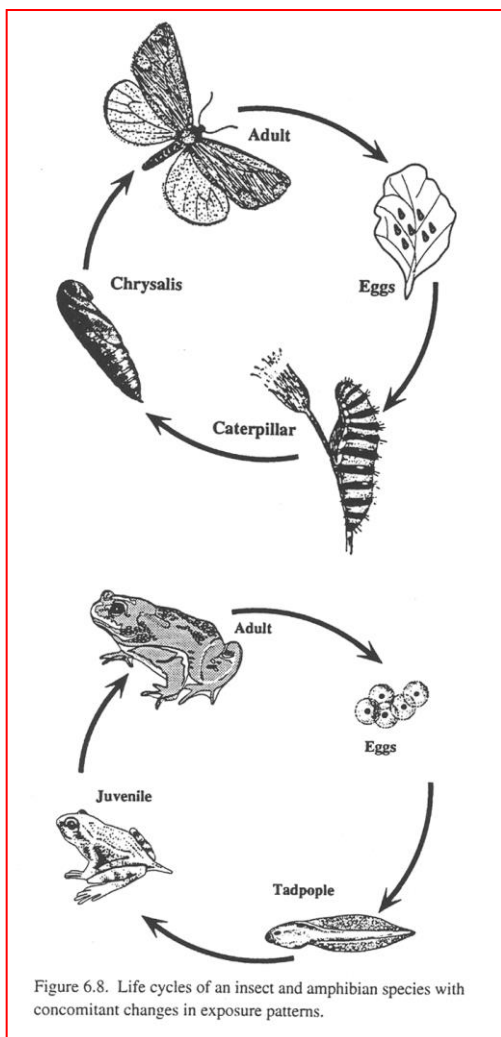
Polutanty přítomné v potravě mohou být přijímány různými mechanismy:

- ↪ látka je desorbována z potravy v GIT s následným transportem přes lipidní membrány,
- ↪ potrava je vstřebávána, následuje uvolnění z potravní matrice a transport přes lipidní membrány,
- ↪ kontaminanty jsou uvolňovány z potravy spolu s živinami a následuje transport přes membrány.

Bioobohacování



Bioobohacování



Bioobohacování

Figure 6-7
The bioaccumulation and biomagnification of PCBs in the Great Lakes aquatic food chain. (Source: *The State of Canada's Environment*, 1991. Ottawa: Government of Canada.)

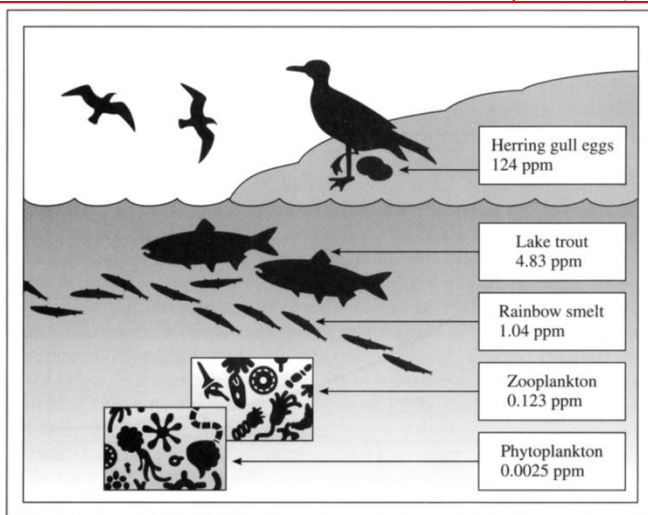


Figure 6-3
Simplified food web for the Great Lakes with typical DDT concentrations for

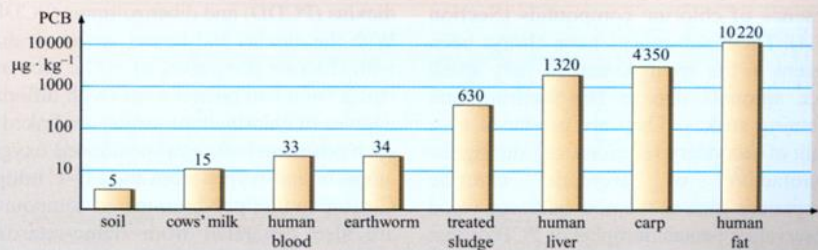
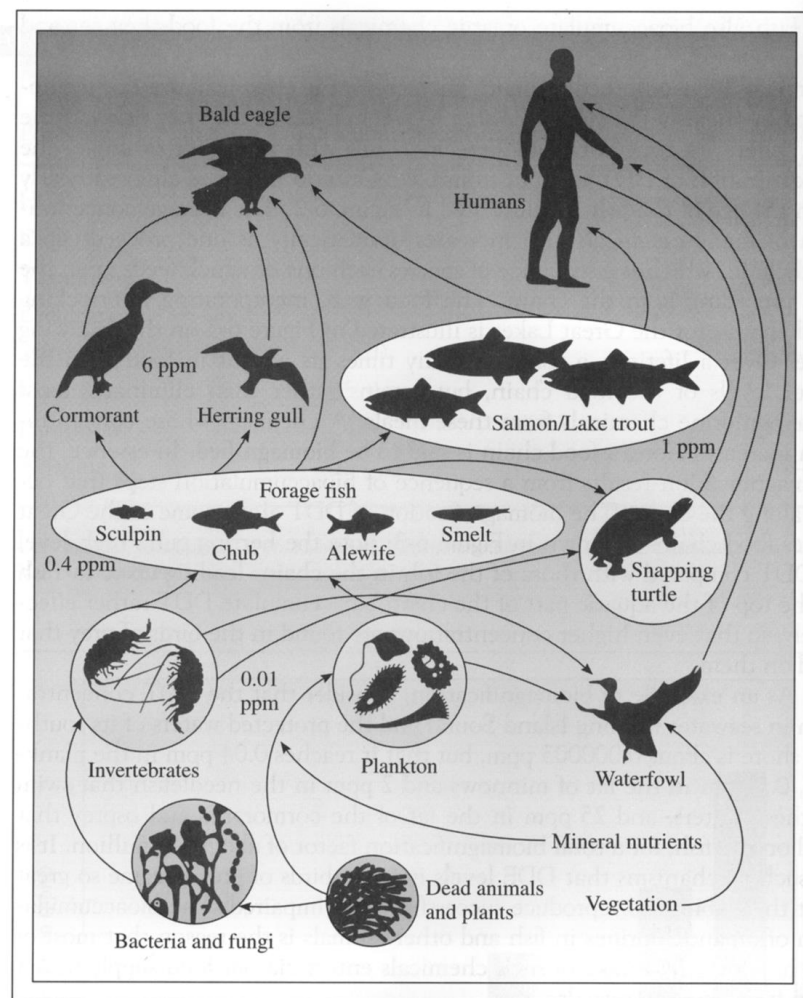
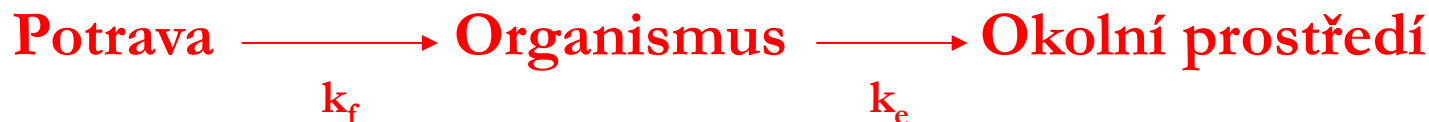


Figure 5.3.6 Bioaccumulation of PCBs

Bioobohacování

Bioobohacování – příjem potravou a eliminace zpět do prostředí může být popsána analogicky biokoncentrací:



Kde:

k_f – konstanta rychlosti příjmu z potravy [$\text{kg.kg bw}^{-1}.\text{d}^{-1}$]

$$k_f = E_f * f$$

Kde:

E_f – účinnost příjmu z potravy

f – rychlost krmení [$\text{kg food.kg bw}^{-1}.\text{d}^{-1}$]

Bioobohacování

Bioobohacování můžeme vyjádřit:

$$dC_O / dt = E_f * f * C_{\text{food}} - k_e * C_O$$

Kde:

C_{food} – koncentrace v potravě [mol.kg food⁻¹]

Hodnota f je závislá na biologickém druhu a na délce života.

Pokud je f konstantní:

$$C_O(t) = (E_f * f * C_{\text{food}}) / (k_e * [1 - e^{-k_e * t}])$$

Bioobohacování

Hodnoty f se pohybují pro ryby přibližně v rozmezí 0,02–0,05 kg potravy.kg t.v.⁻¹.d⁻¹

Pro expozici z potravy můžeme odvodit **bioobohacovací faktor (BMF)** pro ustálené podmínky:

$$\text{BMF} = E_f * f / k_e = C_O / C_{\text{food}}$$

Bioobohacování

Příjem ze sedimentů

Řada vodních organismů žije v zóně dna a konzumují sedimenty nebo detritus jako hlavní potravní zdroj.

Pro tyto organismy je příjem látek ze sedimentů významným zdrojem kontaminace – přitom sedimenty mohou obsahovat mnohem vyšší koncentrace než vlastní vodní těleso.

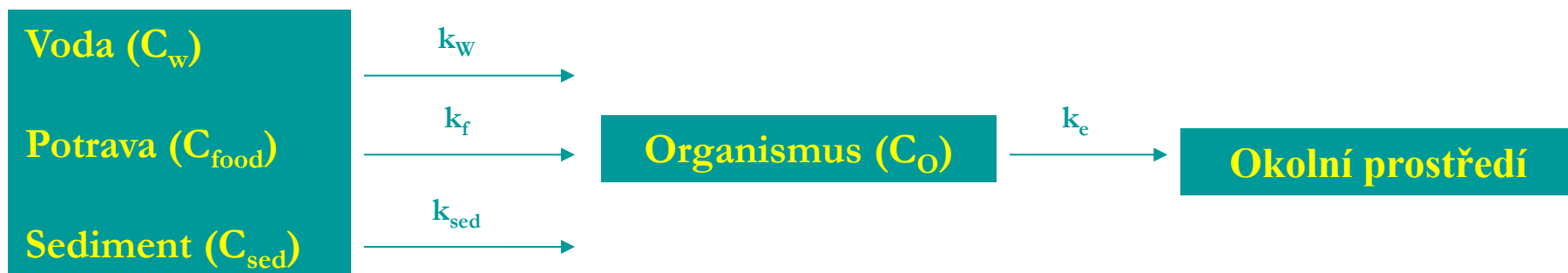
Koncentrace polutantů v sedimentech ne vždy reflektují expozici organismů danými látkami.

To může být dáno konzumací jemných částic suspendovaných sedimentů a detritu, jež obsahují značné množství organického uhlíku s vázanými polutanty (až o řád více než původní sediment).

Koncentrace v sedimentové vodě mohou být jiné než ve vodě vodního tělesa.

Kombinovaný příjem z vody, potravy a sedimentů

Může nastat u xenobiotik, dominantní cesta závisí na fyzikálně-chemických vlastnostech látky, habitatu a fyziologických vlastnostech organismu.



Kde:

k_{sed} – rychlostní konstanta příjmu látky ze sedimentů [$\text{kg sed.kg bw}^{-1}.\text{d}^{-1}$] – analogická příjmu z potravy

k_w , k_f , k_{sed} – rychlostní konstanty příjmu z jednotlivých medií – mohou být nahrazeny součinem účinnosti příjmu (E_w , E_f , E_{sed}) a toků z vody žábry (V_w), z potravy přes zažívací trakt (f) nebo ze sedimentů přes zažívací trakt (S) organismu:

$$k_w = V_w * E_w$$

$$k_f = f * E_f$$

$$k_{sed} = S * E_{sed}$$

Změna koncentrace látky v organismu může být popsána:

$$dC_o / dt = (V_w * E_w * C_w + f * E_f * C_{food} + S * E_{sed} * C_{sed}) - k_e * C_o$$

Bioakumulace v terestrických rostlinách

Kontaminace rostlin:

- ↪ aplikace pesticidů,
- ↪ suchá a mokrá depozice látek,
- ↪ zemědělské používání aktivovaného kalu,
- ↪ skládkování toxických odpadů,
- ↪ kontaminace půd a podzemních vod.

Expoziční mechanismy, biodostupnost a akumulační procesy jsou v terestrickém ekosystému velice komplikované.

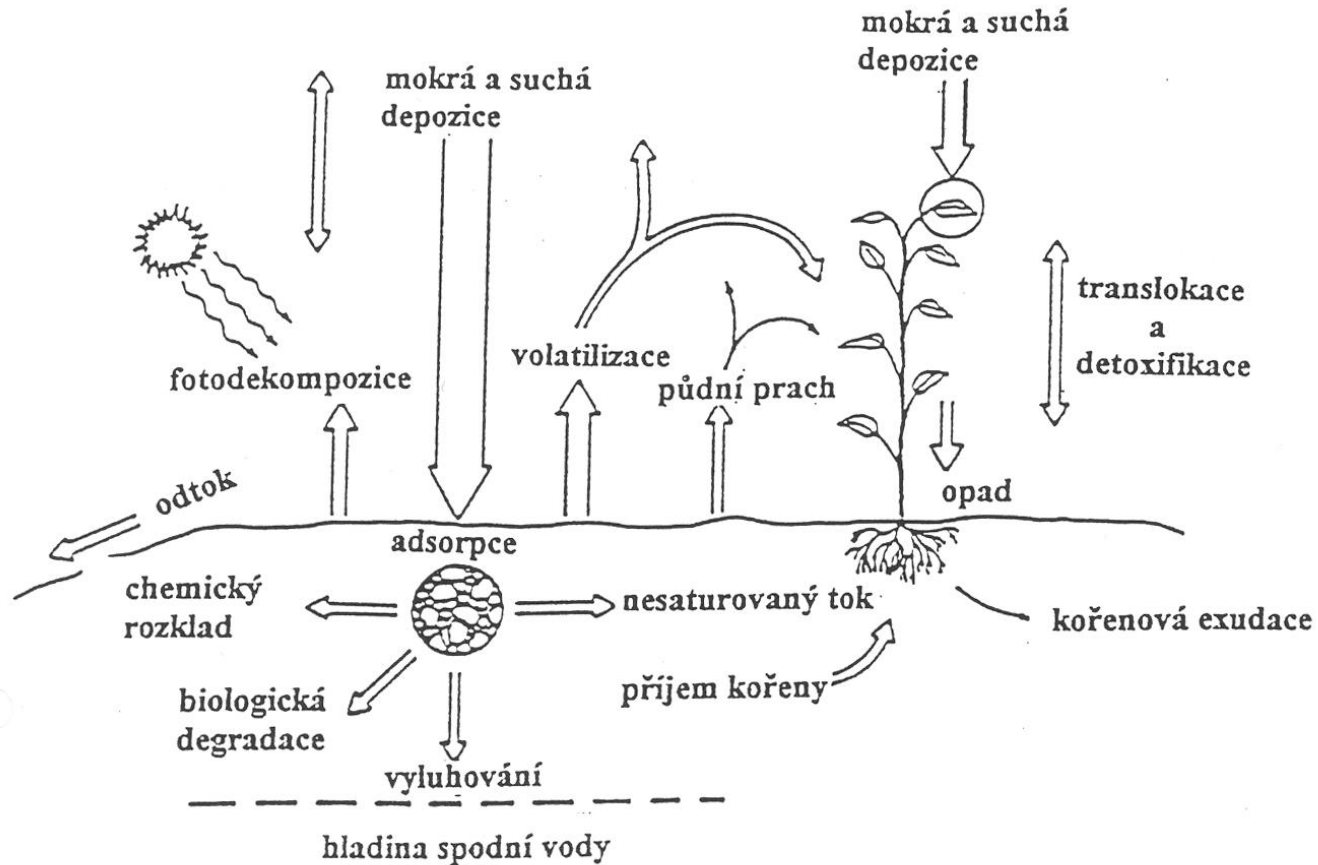
Bioakumulace v terestrických rostlinách

Příjem polutantů vegetací:

- ↪ kořenovým systémem z půdního roztoku
- ↪ adsorpcí na povrchu kořenů
- ↪ foliárním příjem těkavých látek (průduchy)
- ↪ absorpcí povrchem listů (kutikulou)

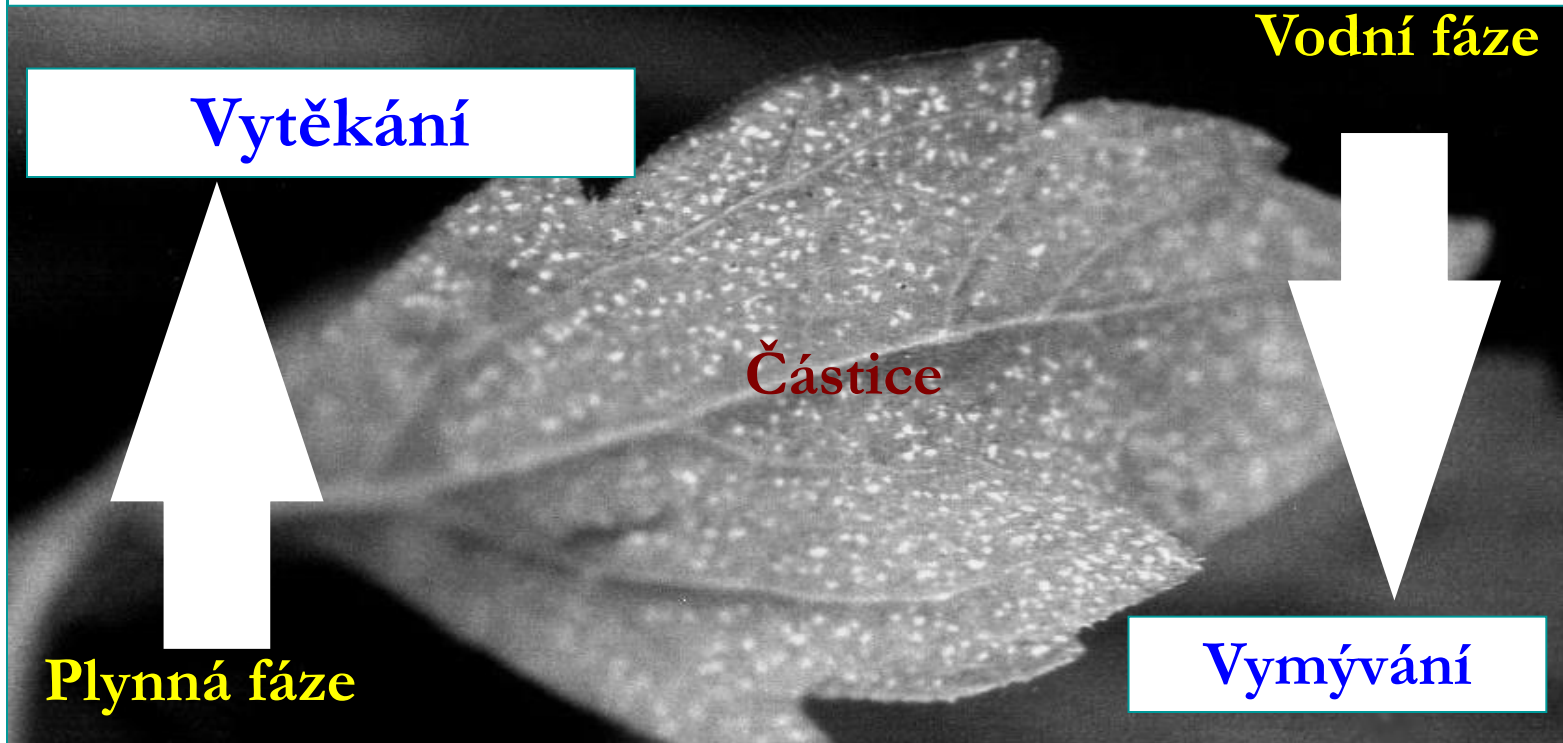
Bioakumulace v terestrických rostlinách

Schéma působení vzdušných polutantů na terestrický ekosystém



Bioakumulace v terestrických rostlinách

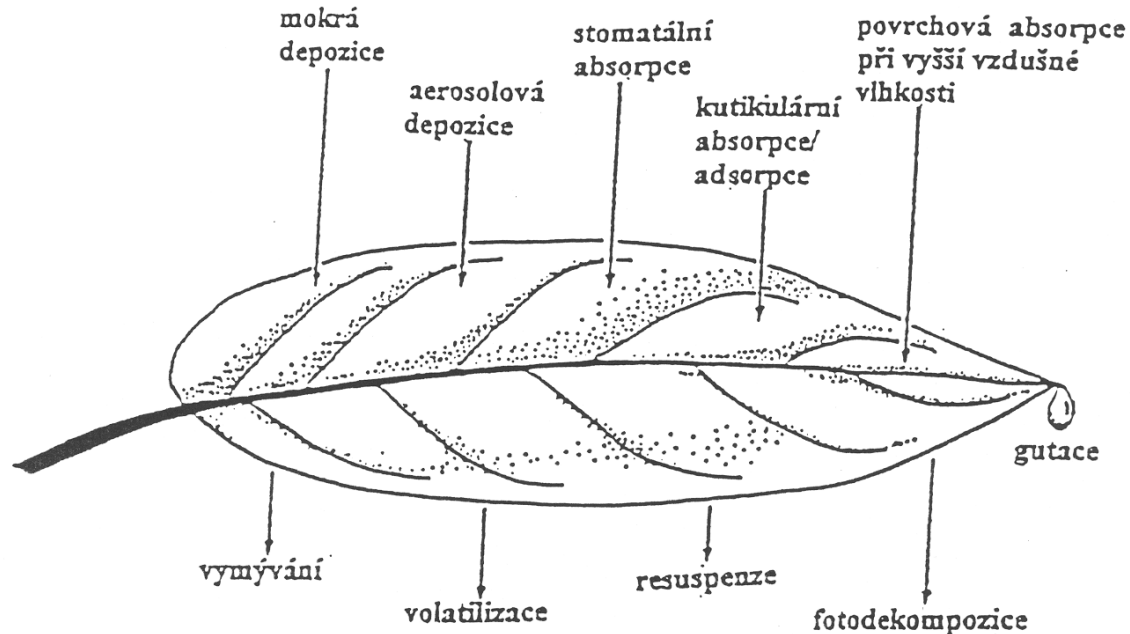
Atmosféra: teplota, srážky, záření, další vzdušné polutanty, rychlost depozice



Rostlina: poměr povrch/objem, struktura vosku, obsah lipidů, rychlost růstu, rostlinná morfologie

Bioakumulace v terestrických rostlinách

Schéma působení vzdušných polutantů na list



Bioakumulace v terestrických rostlinách

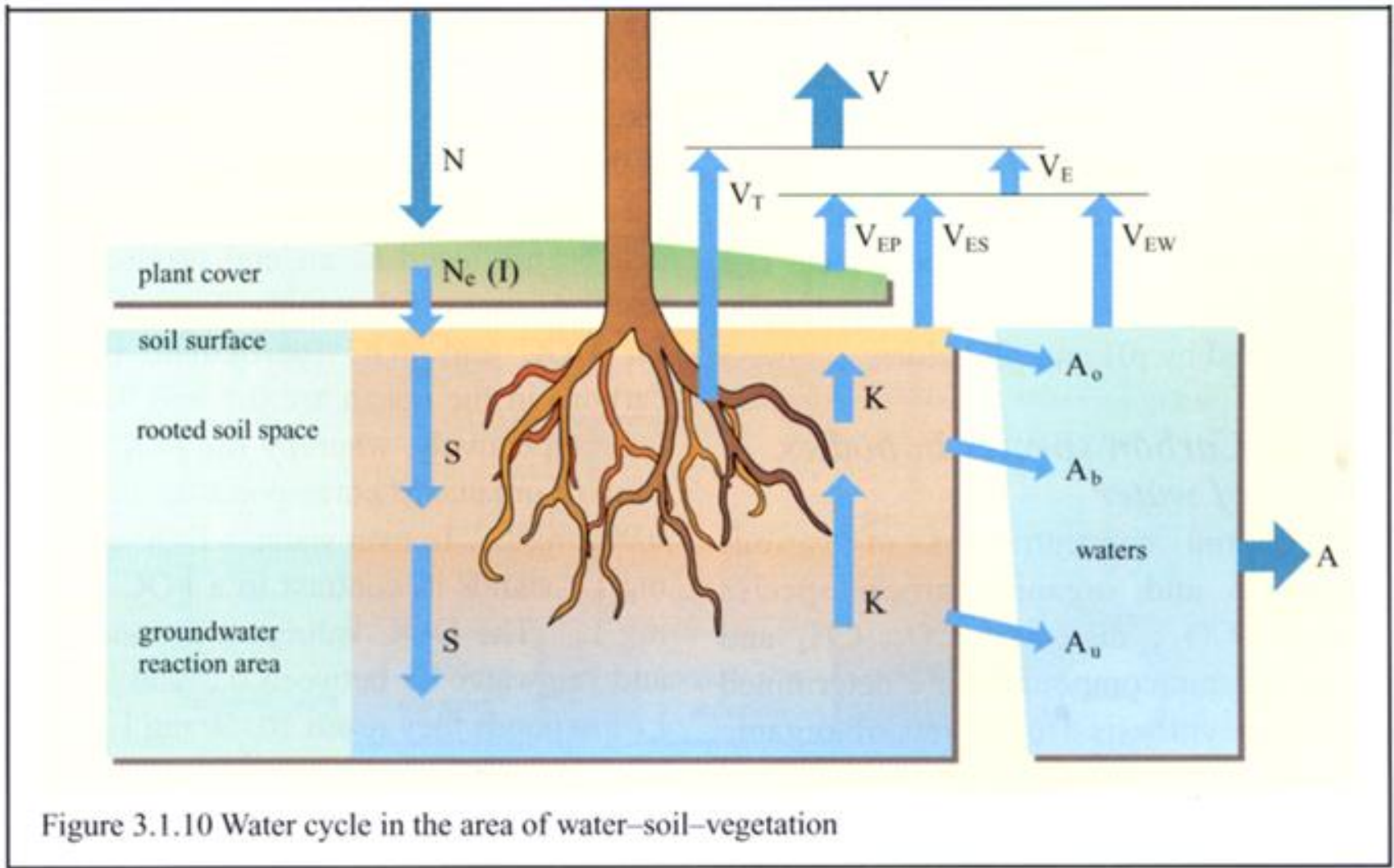
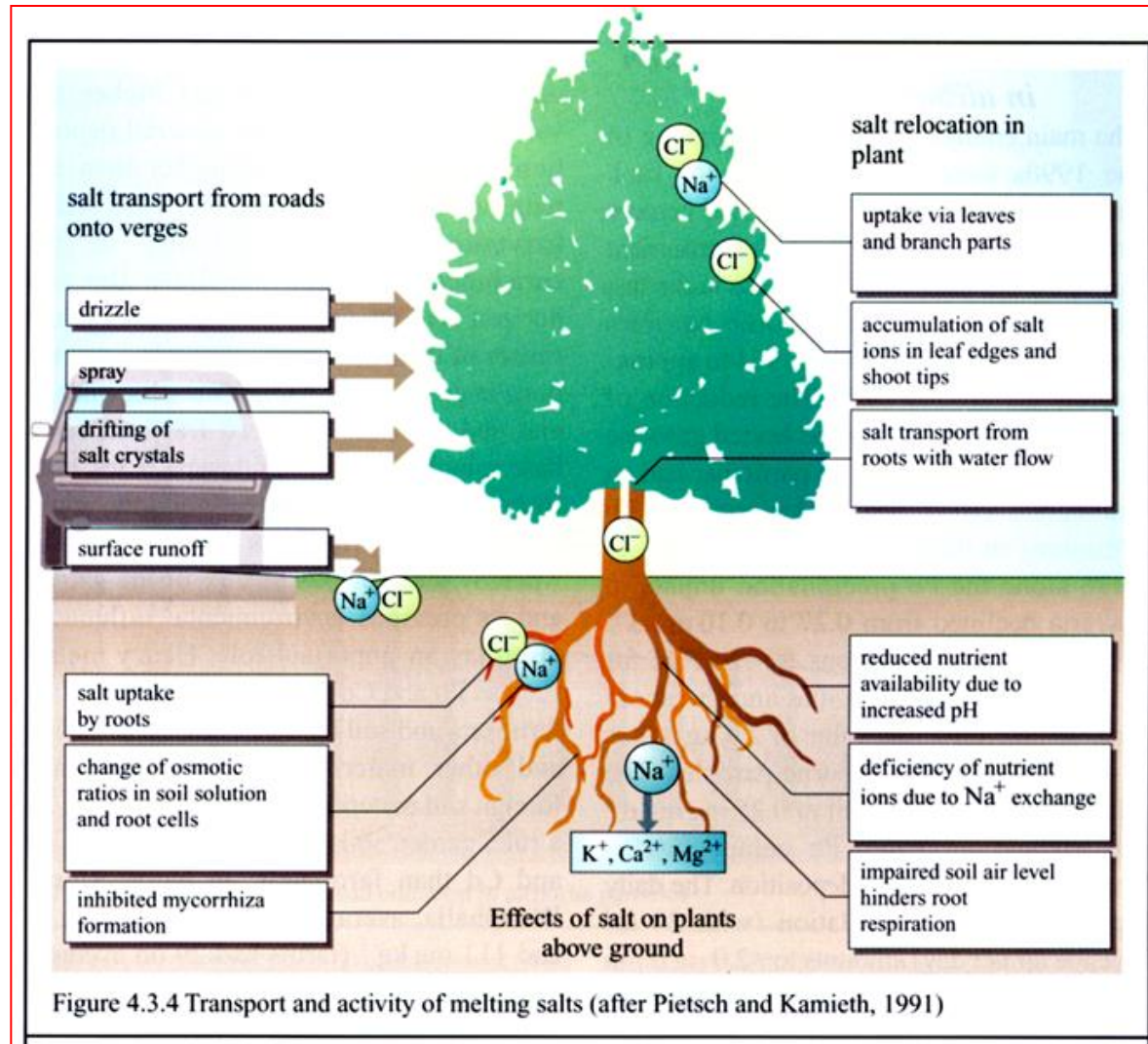
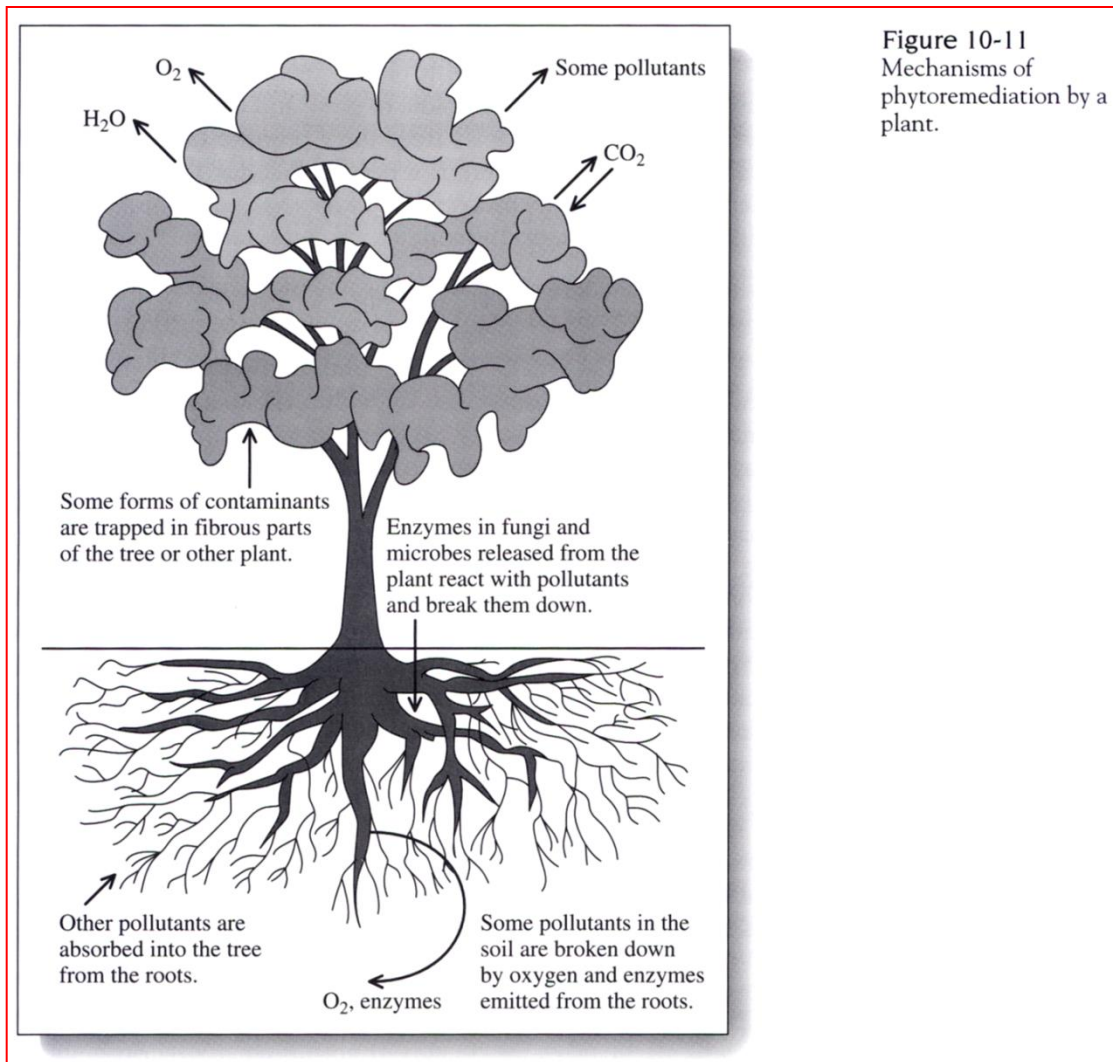


Figure 3.1.10 Water cycle in the area of water-soil-vegetation

Bioakumulace v terestrických rostlinách



Bioakumulace v terestrických rostlinách



Bioakumulace v terestrických rostlinách

Příjem kořeny

Ve vodě rozpustné látky jsou obvykle přijímány kořeny spolu s vodou.

Hydrofóbní látky mohou být sorbovány na povrch kořenů z půdy nebo podzemní vody.

Hlavní transportní proces pro vodu a xenobiotika v rostlině je celkový tok vody do xylému.

Transport xylémem je vyvolán evapotranspirací vodní páry z listoví do ovzduší.

Bioakumulace v terestrických rostlinách

Příjem kořeny/II

Xylém je základní transportní systém pro spojení vody a minerálů vzhůru z kořenů.

Voda je absorbována z půdního roztoku v kůře nebo vnějších tkáních kořenů.

Voda se pohybuje do středu kořenů do endodermis.

Látka prochází přes endodermis a obohacuje xylém.

Tento průnik závisí na **polaritě látky a molekulární konfiguraci daného xenobiotika.**

Bioakumulace v terestrických rostlinách

Příjem kořeny/III

Látka se může sorbovat, vázat nebo metabolizovat v endodermis před obohacováním v xylému.

Látky, které obohacují xylém jsou transportovány rostlinou v transpiračním proudu nebo míze.

Během tohoto transportu mohou reagovat s/nebo se rozdělovat do různých rostlinných tkání.

Mohou být degradovány nebo vstupovat do atmosféry póry stomat, jež se nacházejí hlavně v listech.

Bioakumulace v terestrických rostlinách

Příjem kořeny/IV

- Translokace látek transpirací** do vyšších částí rostlin jako jsou stonky nebo listy většinou závisí na hydrofóbitě látky (K_{OW}).
- Silně hydrofilní látky** ($\log K_{OW} < 0$) a **silně hydrofóbní látky** ($\log K_{OW} > 3$) jsou v rostlinách jen pomalu translokovány.
- Středně hydrofóbní látky** ($0 < \log K_{OW} < 3$) jsou hlavně transportovány prostřednictvím xylému – tento transport je rychlý, protože rostlina transpiruje velká množství vody.
- Příjem řady látek kořeny rostlin je nepřímo úměrná rozpustnosti ve vodě** (nebo nepřímo úměrná K_{OW}).

Bioakumulace v terestrických rostlinách

Příjem kořeny/V

Silně hydrofóbní látky mají tendenci k biokoncentraci v kořenech.

**Obsah organické hmoty ovlivňuje rovněž osud látky v systému
půda/rostlina – hydrofóbní látky jsou silně sorbovány a méně
biodostupné.**

Bioakumulace v terestrických rostlinách

Foliární příjem

Pokud není parciální tlak látky příliš nízký, látka může **těkat z půdy** do ovzduší a může vstupovat do nadzemních částí rostlin.

Nadzemní část rostlin včetně listoví je pokryta **kutikulami**, jež hrají rozhodující roli jako **bariera snižující ztráty vody z rostliny a zabraňují penetraci částic z atmosféry**.

Kutikuly jsou pokryty kutikulárním voskem.

Bioakumulace v terestrických rostlinách

Foliární příjem/II

Povrch listů rovněž obsahuje **malé póry nebo stomata**, jež se otvírají nebo zavírají dle environmentálních podmínek.

Stomata hrají důležitou roli v procesu **výměny plynů a v transpiraci**.

Kyslík je přijímán a oxid uhličitý vylučován respirací a CO_2 je přijímán a kyslík vylučován fotoasimilací.

Látky mohou vstupovat do listové prostřednictvím kutikul nebo stomat.

Bioakumulace v terestrických rostlinách

Foliární příjem/III

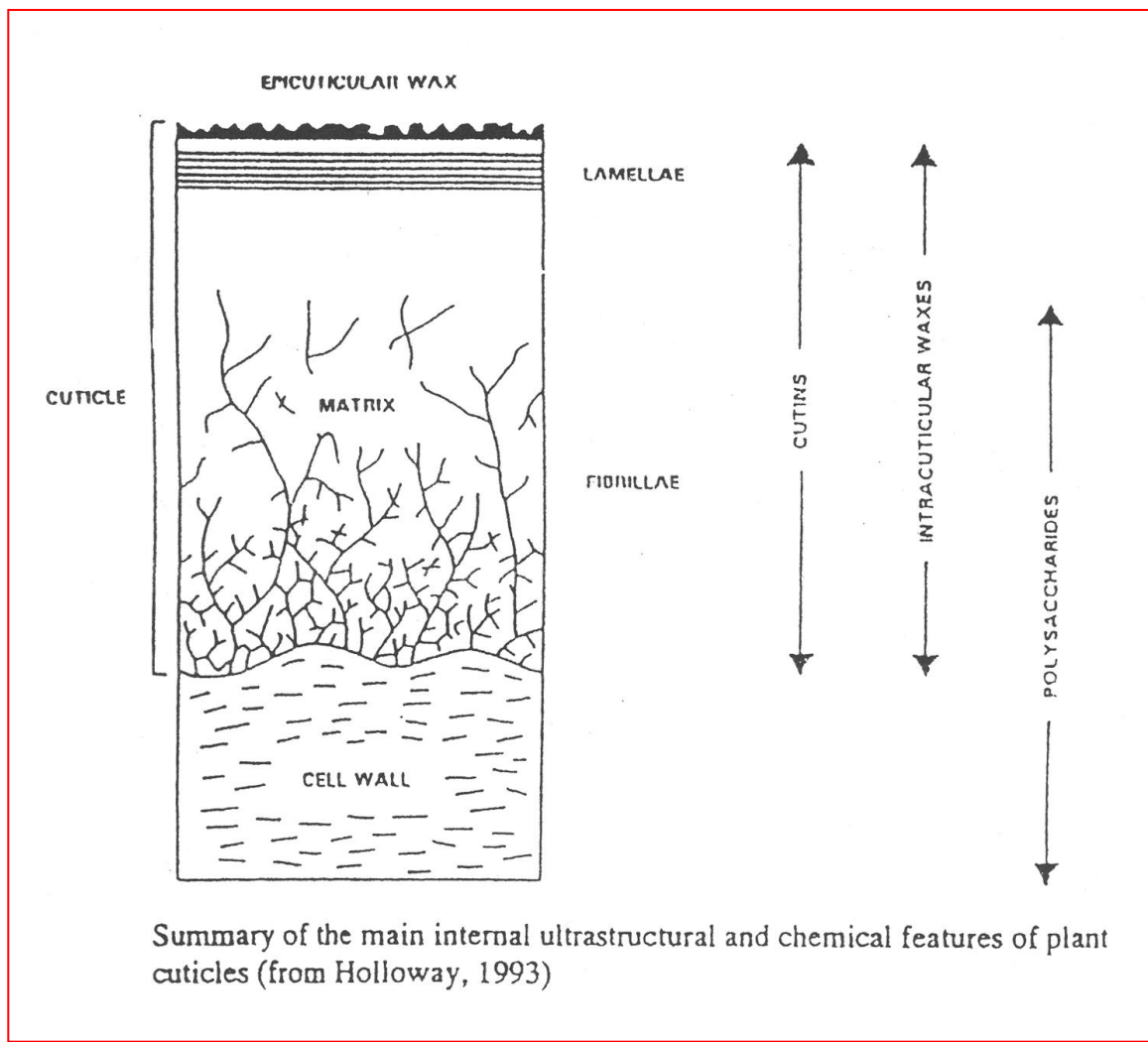
Cesty příjmu kontaminantu listovím zahrnují:

- ↪ přímou aplikaci – například při použití pesticidů,
- ↪ depozici prachu nebo atmosférických tuhých částic,
- ↪ příjem okolních par absorpcí přes kutikula nebo stomata.

Látky rozstříkované nebo deponované na listy mohou být distribuovány do kutikul odkud jsou translokovány rostlinou.

Látky s vyšší rozpustností ve vodě jsou více transportovány rostlinou přes phloem, zatímco méně rozpustné mají tendenci zůstat ve vosku kutikul listů.

Bioakumulace v terestrických rostlinách



Bioakumulace v terestrických rostlinách

Faktory ovlivňující bioakumulaci v rostlinách

Faktory ovlivňující příjem a distribuci organických látek rostlinami jsou:

- ↪ fyzikálně-chemické vlastnosti látky (WS , VP , MW , K_{OW} , K_{AW} , K_{OA}),
- ↪ environmentální podmínky (T , obsah vody, obsah organických a minerálních látek v půdách..),
- ↪ vlastnosti rostlin (typ kořenového systému, tvar, chemické charakteristiky listů, obsah lipidů (vosků)).

Bioakumulace v terestrických rostlinách

Bioakumulační model pro rostliny

Multikompartmentový model.

Součástí modelu jednak fyziologické části rostlin – kořeny, stonek, listy, jednak chemické komponenty – voda, cukry, proteiny, lipidy.

Pro hydrofóbní sloučeniny – pro modelování bioakumulace jako funkce rozdělení mezi ovzduší a rostlinu se využívá velikost kompartmentů a distribuční koeficienty vzduch-voda a oktanol-vzduch.

Bioakumulace v terestrických rostlinách

Bioakumulační faktor rostlina-vzduch (K_{BA}):

$$K_{BA} = V_C * K_{CA} + V_W * K_{WA} + V_L * K_{LA} + V_F * K_{FA} + V_P * K_{PA}$$

Kde:

K_{CA} , K_{WA} , K_{LA} , K_{FA} , K_{PA} – rozdělovací koeficienty mezi vzduchem a kutikulárními membránami, vodu, buněčné lipidy, strukturální cukry a proteiny

V_C , V_W , V_L , V_F , V_P – objemové frakce pro uvedené kompartmenty v tkáních listů

Rozdělovací koeficienty jsou odvozovány nejčastěji z rozdělovacích koeficientů K_{OW} a K_{OA} .

Bioakumulace v terestrických bezobratlých

Ingesce potravy obsahující kontaminanty – primární cesta příjmu, dále může hrát roli i obsah kontaminantů v pórové vodě.

Příjem z potravy je významný pro silně hydrofóbní organické látky ($\log K_{ow} > 5$).

Bioakumulace v terestrických bezobratlých

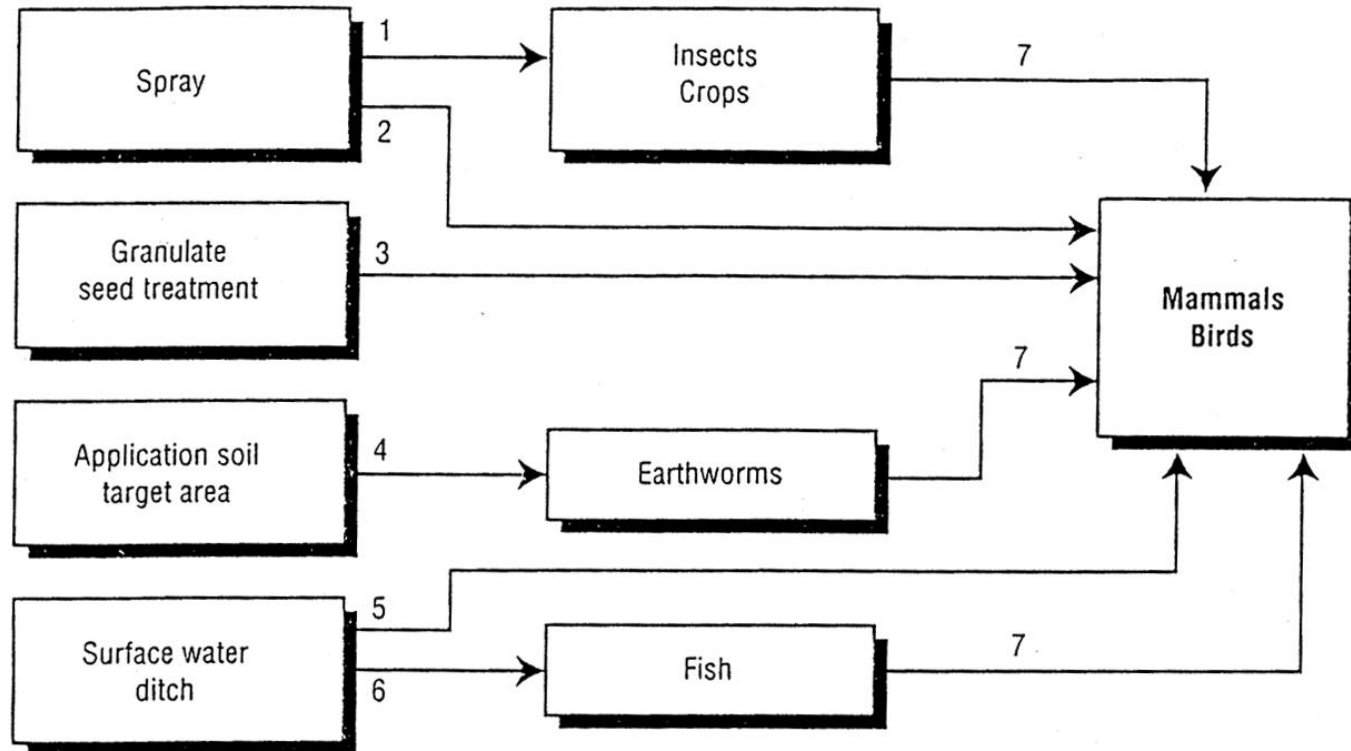


Figure 3.28. Food as a major source of contaminants for mammals and birds in a simplified food web. 1 = Application of spray, 2 = Drinking from leaves/crops, 3 = Ingestion of granules/treated seeds, 4 = Bioconcentration soil-worm, 5 = Drinking from surface water, 6 = Bioconcentration water-fish, 7 = Consumption. From USES [44]. With permission.

Bioakumulace v terestrických bezobratlých

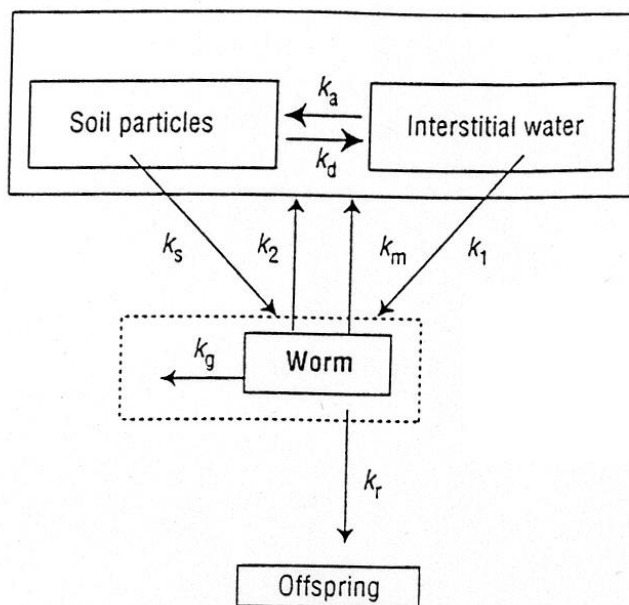


Figure 3.27. Diagram showing the relationship between soil particles, soil interstitial water and the earthworm where k_d is the desorption rate constant, k_a the sorption rate constant, k_s the dietary uptake rate constant, k_1 the uptake rate constant from interstitial water, k_2 the elimination rate constant, k_m the metabolic rate constant, k_g the growth rate constant and k_r the reproduction rate constant. From [38]. With permission.

Table 3.7. Bioaccumulation factors of 1,2,3,4-tetrachlorobenzene (TeCBz), pentachlorobenzene (pCBz) and hexachlorobenzene (HxCBz) from water, soil and food by the earthworm *Eisenia andrei* [38]

		TeCBz	pCBz	HxCBz
Water	BCF (L/kg) ^a	1000	4300	6600
Sediment	BSAF (kg _{sediment} /kg) ^a	1.3	1.9	2.6
Food	BMF (kg _{food} /kg) ^a	-	0.032	0.068

^a BCF is the bioconcentration factor. BSAF is the biota-to-sediment accumulation factor and BMF is the biomagnification factor.

Table 3.8. Dietary uptake efficiencies for cadmium (Cd) in terrestrial invertebrates [39]

Species	Food	Cd concentration in food (μmol/g)	Uptake efficiency (%)
Snail	agar	1.48	55-92
Isopod	poplar leaves	0.03-0.37	10-60
Centipedes	isopod hepatopancreas	1.21-10.2	0-7
Millipedes	maple leaves	-	8-40
Pseudoscorpion	collembolans	0.2	59
Mites	green algae	0.15	17
Insects	green algae	0.09-0.15	9
	collembolans	0.23	35

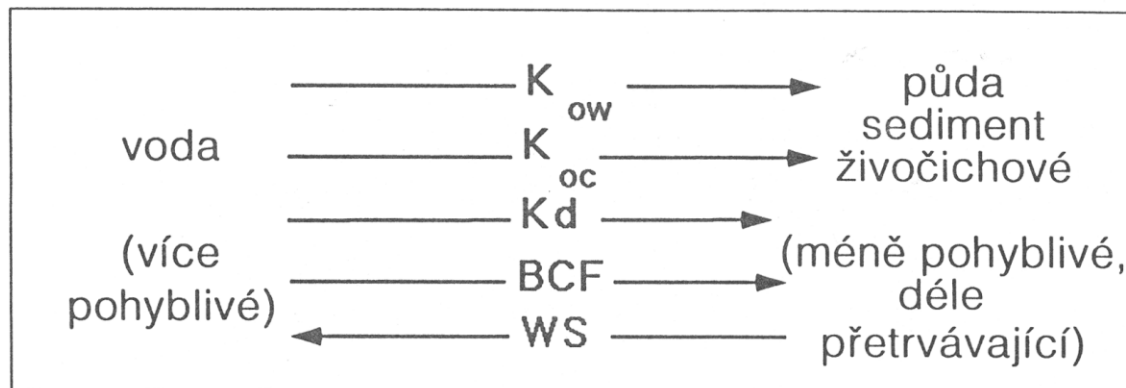
Vztahy mezi environmentálními parametry

Charakterizujte chemikálie

prostředí

parametr

prostředí



Hodnocení expozice

Biodostupnost – klíčový pojem

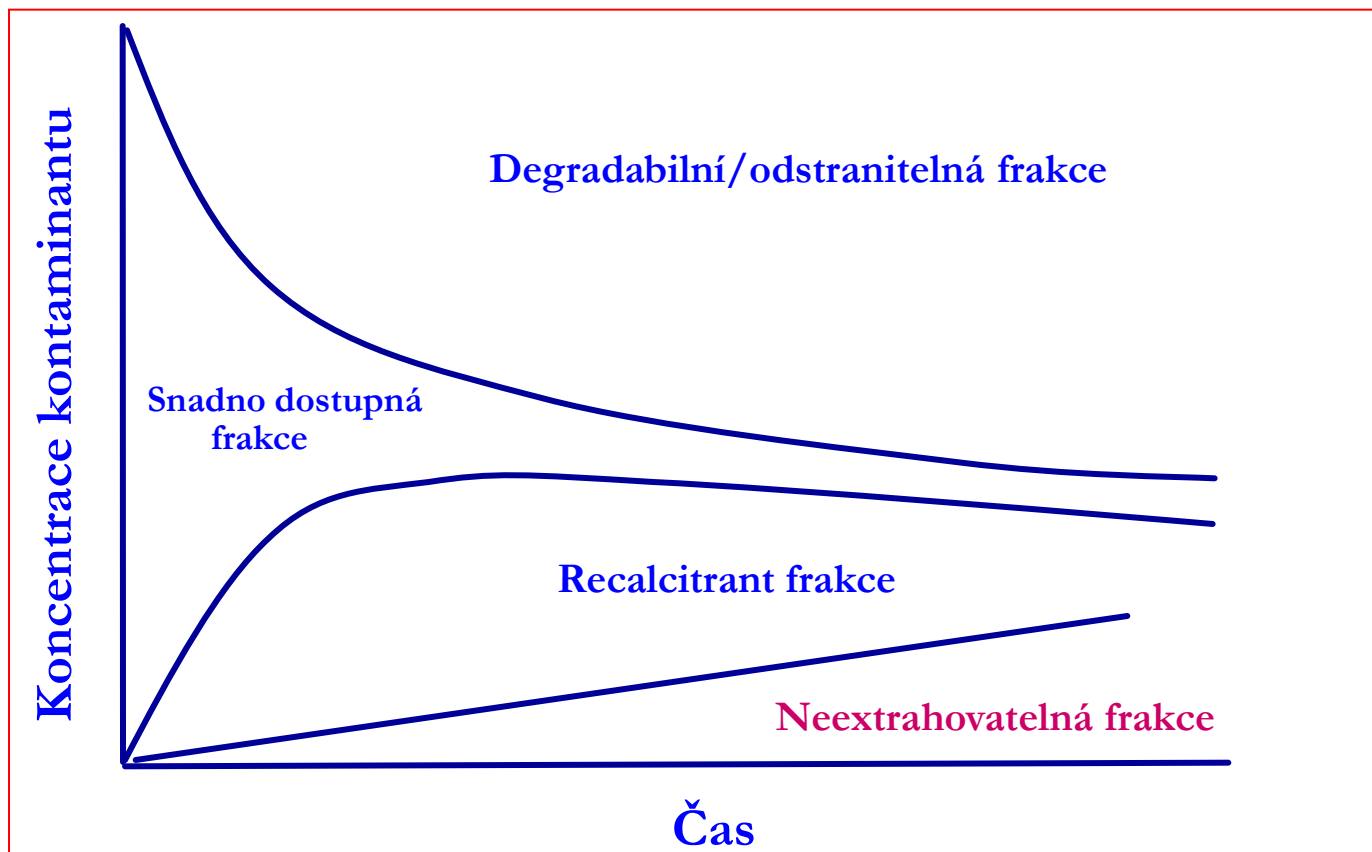
Proces biodostupnosti může být definován jako jednotlivé fyzikální, chemické a biologické interakce, které určují expozici organismů chemickými látkami vázanými na povrch půd a sedimentů.

Biodostupnost - definice

- ↪ **Schopnost žijících organismů přijmout chemické látky z potravy nebo z jejich abiotického prostředí do té míry, že se chemická látka zapojí do metabolismu tohoto organismu**
- ↪ **Stupeň a rozsah uvolnění chemické látky z půdy do prostředí, tedy do vody a do vzduchu, nebo přenosu na ekologické a humánní receptory umožněným dermálním kontaktem, potravou nebo inhalací**

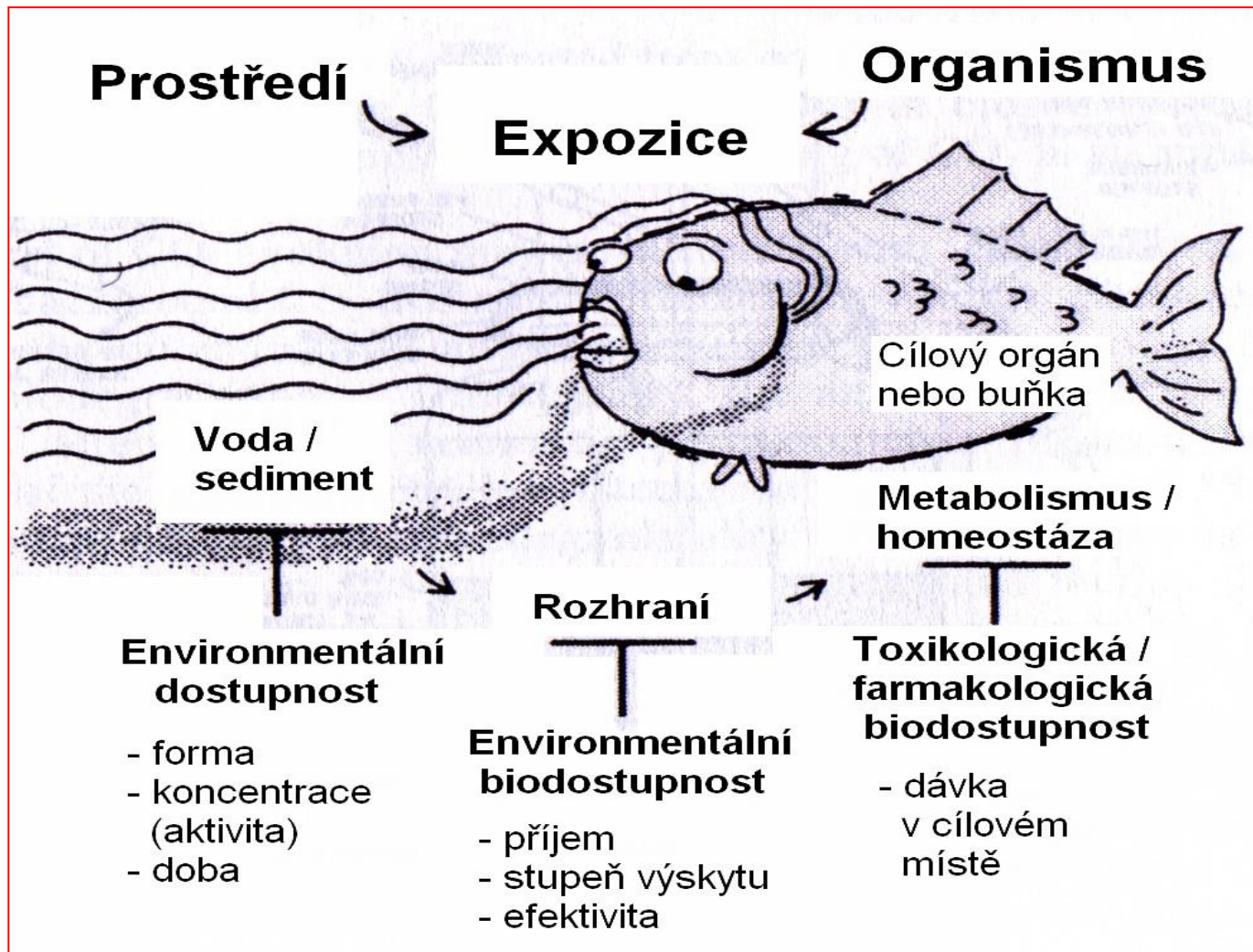
Osud a chování organických látek v půdách

??? Co je skutečně nebezpečné, škodlivé, rizikové a co není ???



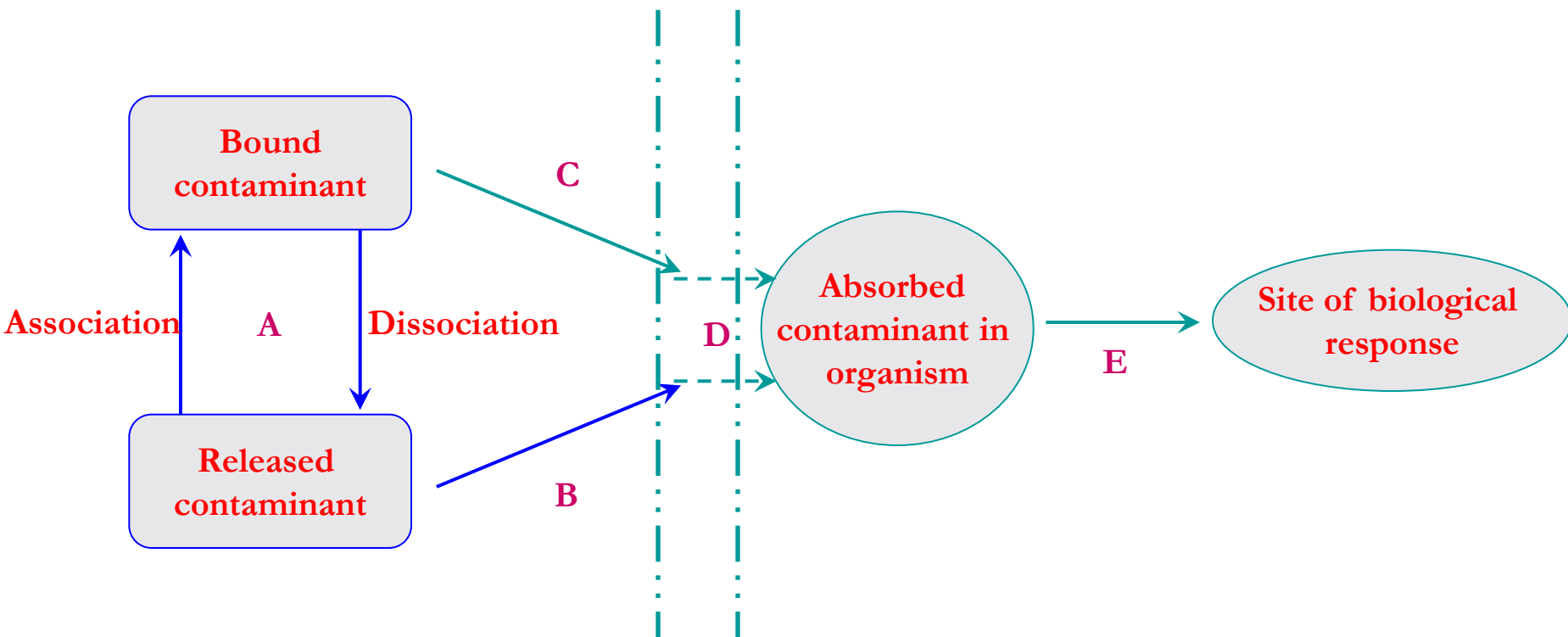
Klíčová otázka – biodostupnost – v Evropě je více než 500 000 kontaminovaných míst – kde je cíl limitů ???

Biodostupnost - definice



Biodostupnost

Cellular membrane



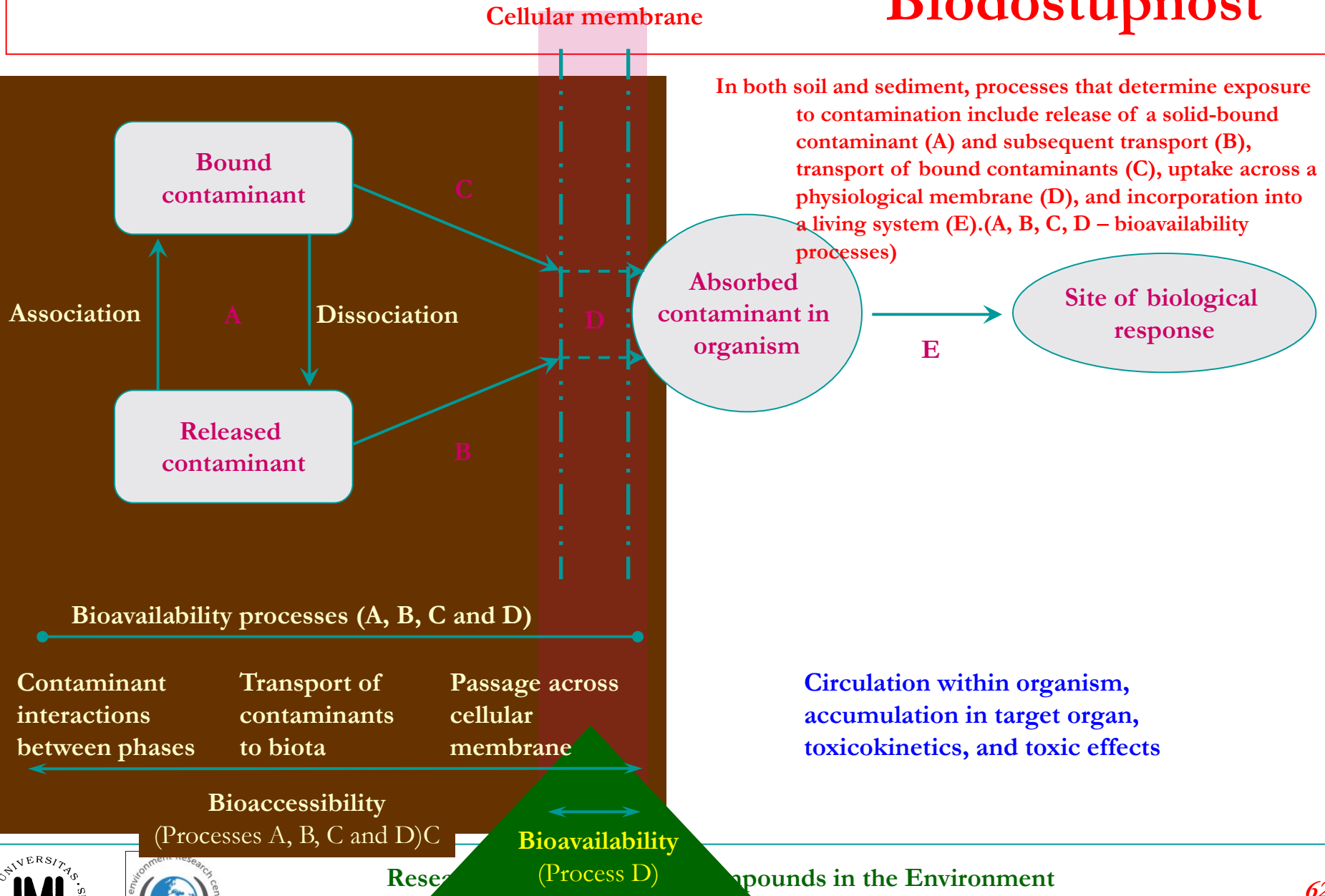
Contaminant interactions between phases

Transport of contaminants to biota

Passage across cellular membrane

Circulation within organism, accumulation in target organ, toxicokinetics, and toxic effects

Biodostupnost



In both soil and sediment, processes that determine exposure to contamination include release of a solid-bound contaminant (A) and subsequent transport (B), transport of bound contaminants (C), uptake across a physiological membrane (D), and incorporation into a living system (E). (A, B, C, D – bioavailability processes)

Contaminant interactions between phases

Transport of contaminants to biota

Passage across cellular membrane

Circulation within organism, accumulation in target organ, toxicokinetics, and toxic effects

Biodostupnost/biopřístupnost

- ↪ **Bioavailability is the fraction of a contaminant actually available at a given moment in time in soil.**
- ↪ **Biodostupná je frakce kontaminantu, jež je skutečně v půdě dostupná v daném časovém okamžiku**
- ↪ **Bioaccessibility encompasses what is actually bioavailable now plus what is '*potentially* bioavailable'.**
- ↪ **Biopřístupné znamená to, co je v daném okamžiku biodostupné plus to, co je potenciálně biodostupné.**

Semple et al., 2004

Biodostupnost – faktory - vlastnosti kontaminantů

↪ K_{OW} - rozdělovací koeficient n-oktanol – voda

$$K_{OW} = c_{\text{oktanol}} / c_{\text{voda}}$$

↪ K_{OC} - množství látky adsorbované na jednotku organického uhlíku

↪ Náboj, ionizovatelnost, reaktivita, tvorba vodíkových můstků

Biodostupnost – faktory - půdní prostředí, složení půdy

↪ Sorpce

↪ pH půdy, reakce v půdě

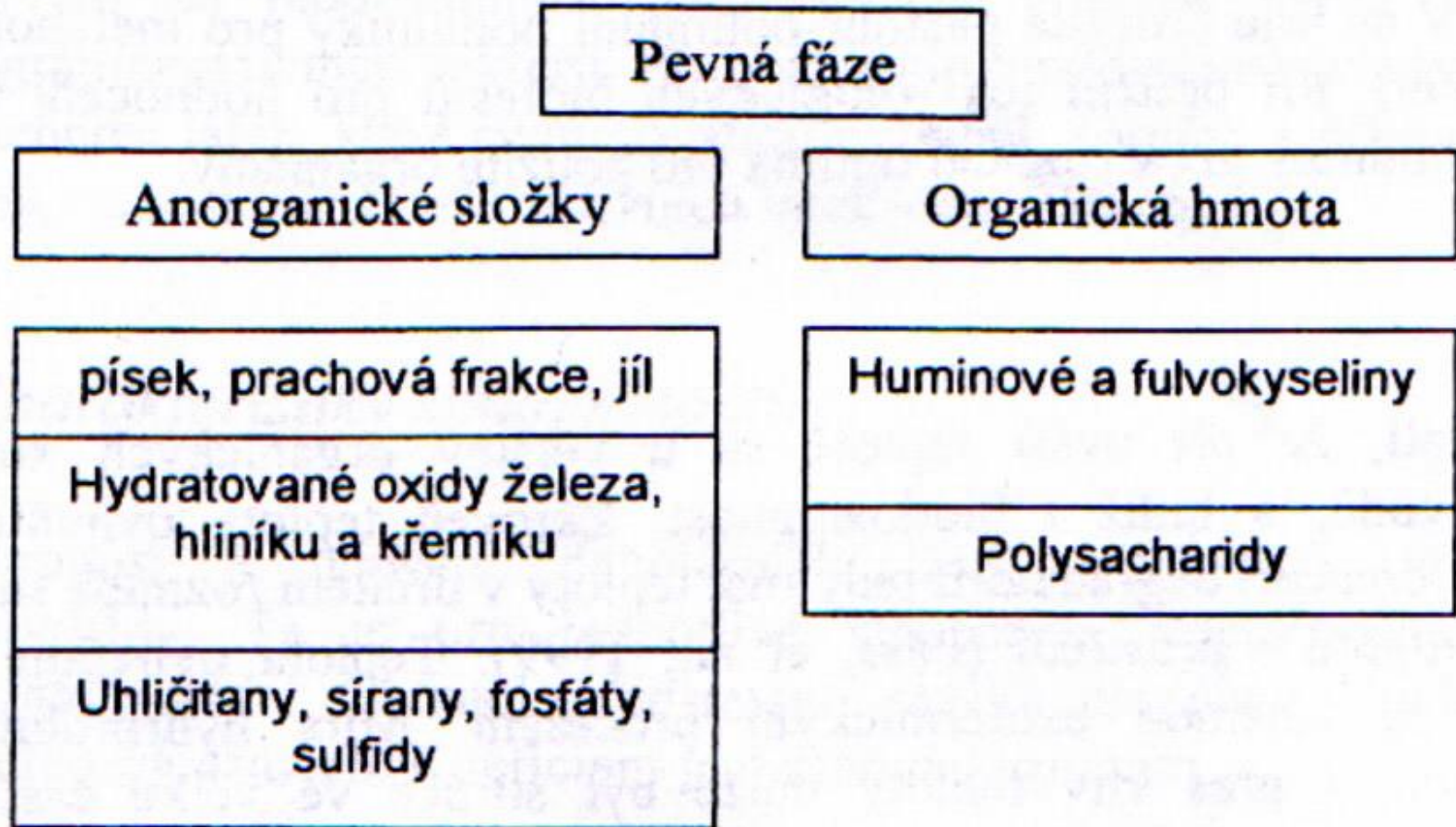
↪ Vlhkost

↪ Kationtová výměnná kapacita

↪ Teplota

↪ Složení půdy

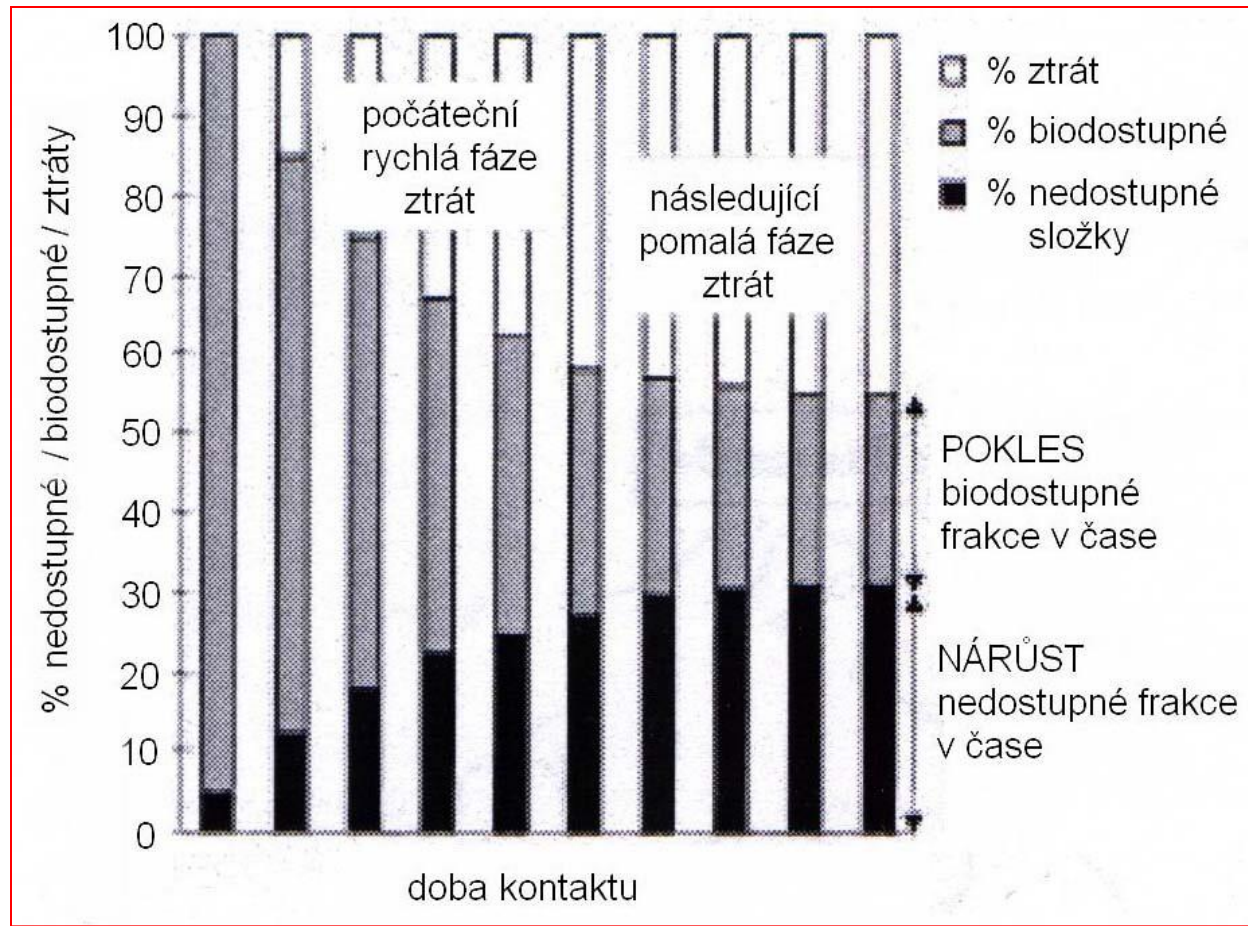
Biodostupnost – faktory - půdní prostředí, složení půdy



Biodostupnost – faktory - půdní prostředí, složení půdy

↪ Transport kontaminantů v půdách

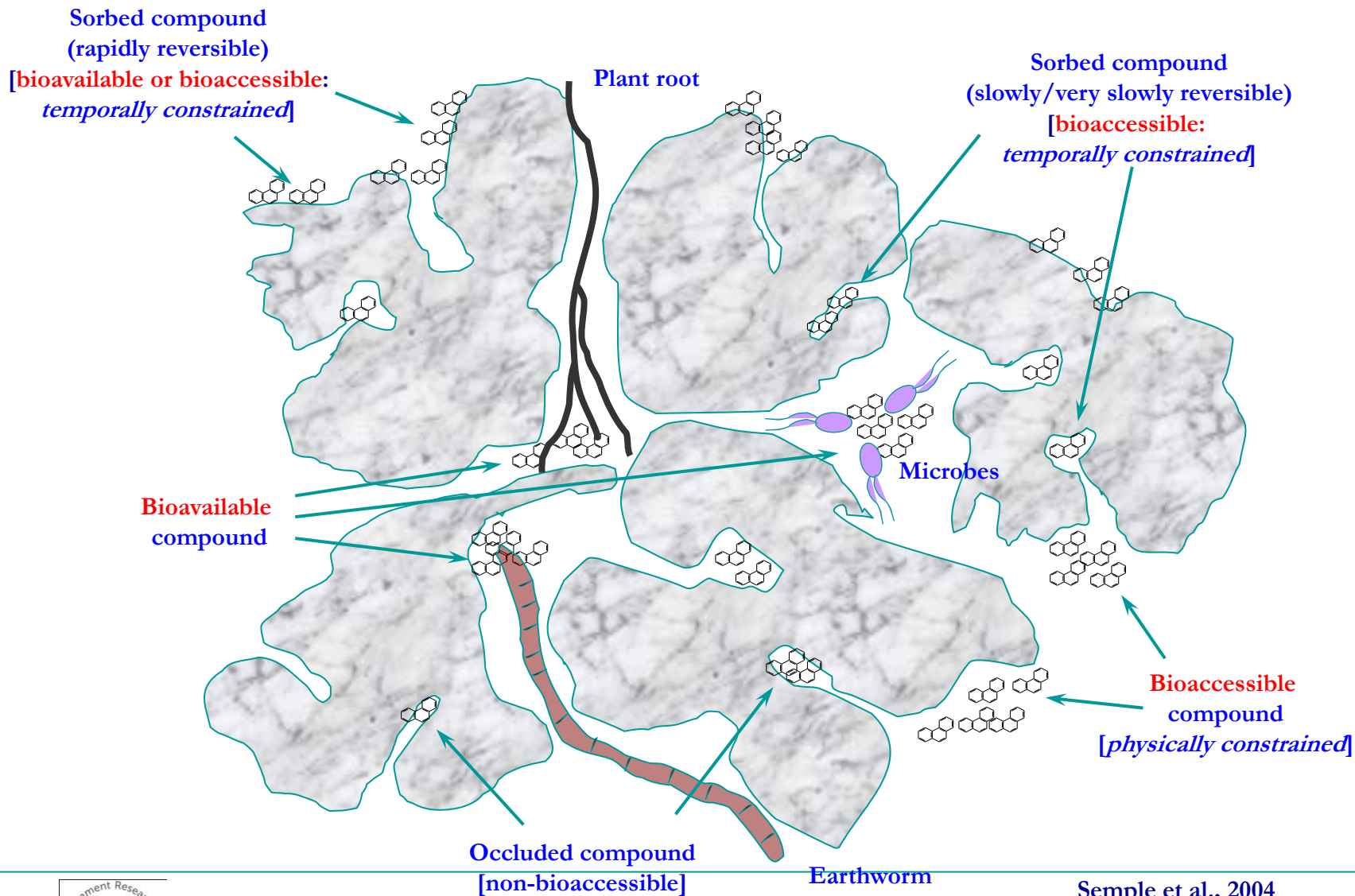
↪ Aging



Biodostupnost – faktory - vlastnosti organismů

- ↪ **Příjem** – potrava, dermální kontakt, inhalace
- ↪ **Metabolismus** – transformace, ukládání v tukové tkáni
- ↪ **Vyloučení** – do půdní vody, do půdy, svlékání, zředění růstem, reprodukce

Biodostupnost/biopřístupnost



Semple et al., 2004

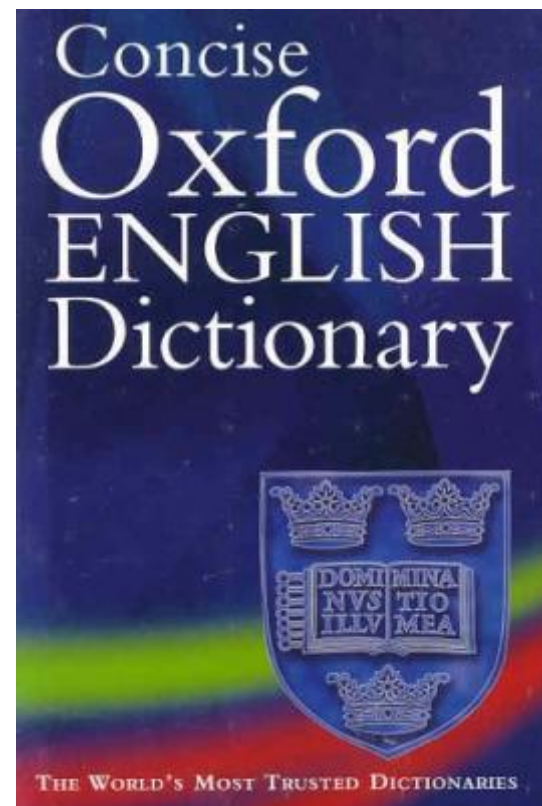
Research Centre for Toxic Compounds in the Environment

<http://recetox.muni.cz>

New definitions (I)

The word **available** is defined in the Concise English Dictionary (1982) as 'capable of being employed; at one's disposal; at hand'

- ↪ There is an implied immediacy to the term; what is available is **available now**
- ↪ Hence, we define the **bioavailable** compound as that which is freely available to cross an organism's (cellular) membrane from the medium the organism inhabits at a given point in time

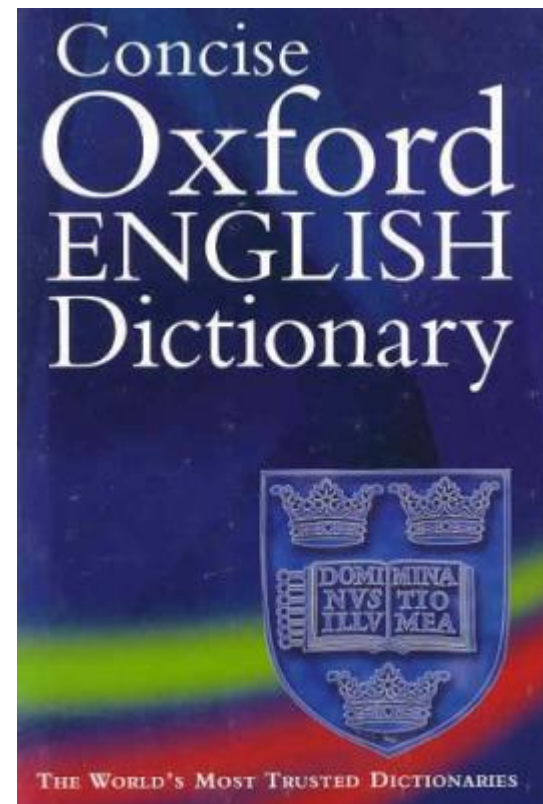


New definitions (II)

The word **accessible** is defined in the Concise English Dictionary (1982) as 'capable of being approached or reached; approachable, attainable.

There is the sense that some of what is accessible **can be reached**, but is not quite within reach or can be reached at a given time.

In our context, there is an **implied constraint** in time and/or space, preventing the organism from gaining access to the chemical now



New definitions (III)

Definition: the *bioaccessible* compound is that which is available to cross an organism's (cellular) membrane from the environment it inhabits, if the organism has access to it; however, it may be either physically removed from the organism, or only bioavailable after a period of time

‘Physically removed’ refers to chemical which is occluded in soil organic matter or because the organism is occupying a different spatial range of the environment than the contaminant

Semple et al., 2004

Summary

Bioavailability is the fraction of a contaminant actually available at a given moment in time in soil.

Bioaccessibility encompasses what is actually bioavailable now **plus** what is '*potentially* bioavailable'.

Semple et al., 2004

Biopřístupná frakce

Biopřístupná frakce se skládá z:

- ↪ Koncentrace látky v půdní pórové vodě
- ↪ Desorbovatelné frakce
- ↪ “Aktivně” desorbovatelné frakce

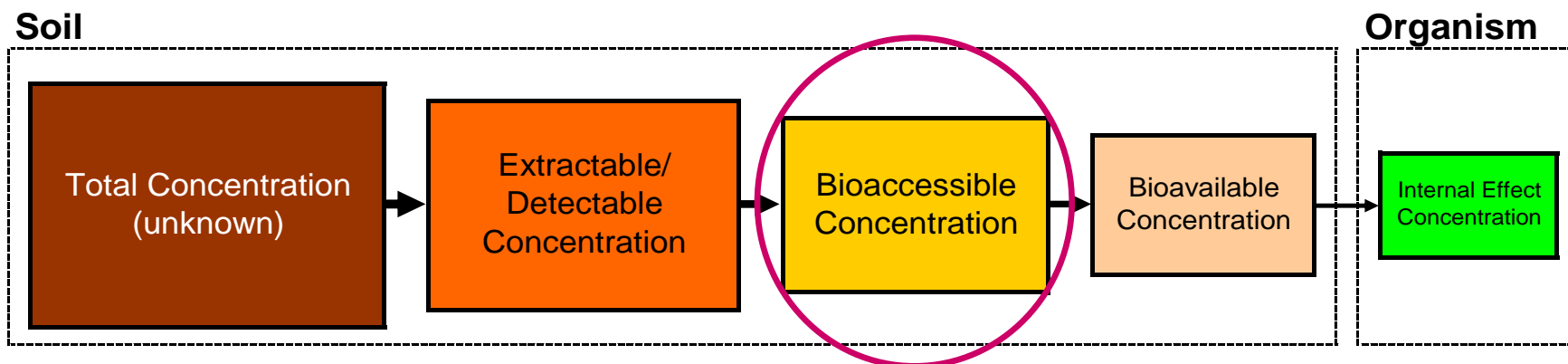


Figure modified from Hammel and Herrchen (1999)