

# Chemie životního prostředí – seminář

Jaromír Literák

Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity

9. listopadu 2017



# Rovnovážná distribuce látek

Rozdělovací koeficient  $\times$  konstanta.

$$K_{12} = \frac{c_1}{c_2}$$

## Rozdělovací koeficient oktanol-voda

$$K_{ow} = \frac{c_o}{c_w}$$

- Míra lipofility látky.
- Typicky  $10^2 - 10^7$ , často udáván jako  $\log K_{ow}$ .
- Experimentálně stanovován nebo odhadován.

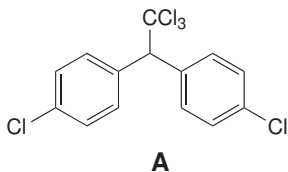
# Rozdělovací koeficient oktanol-voda

Odhad log K<sub>ow</sub> s využitím  $\pi$ -konstant (Fujita a Hansh).

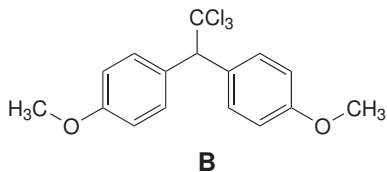
Funkční skupina	$\pi$ -konstanta	Funkční skupina	$\pi$ -konstanta
-NH <sub>2</sub>	-1,23	-F	0,14
-OH	-0,67	-N(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	0,18
-CN	-0,57	-CH <sub>3</sub>	0,56
-NO <sub>2</sub>	-0,28	-Cl	0,71
-COOH	-0,28	-Br	0,86
-OCH <sub>3</sub>	-0,02	-CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	0,98
-H	0,00	-CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	1,35

# Příklad č. 1

- 1 Ze známé hodnoty  $\log K_{ow}$  sloučeniny **A** odhadněte  $\log K_{ow}$  sloučeniny **B**.
- 2 Která ze sloučenin je lipofilnější?
- 3 Kolikrát je jedna sloučenina lipofilnější než ta druhá?



$$\log K_{ow} = 5,87$$



$$\log K_{ow} = ?$$

# Bioakumulace

Bioakumulace  $\times$  biokoncentrace  $\times$  biomagnifikace (bioobohacování)

$$BAF \times BCF \times BMF$$

$$BCF = \frac{C_{organismus}}{C_w}$$

$$C_{org} [\mu\text{g g}^{-1}], C_w [\mu\text{g cm}^{-3}]$$

Za předpokladu  $\rho_w = 1 \text{ g cm}^{-3}$  je  $BCF$  bezrozměrný.

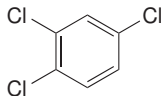
Empirické vztahy mezi  $K_{ow}$  a  $BCF$ , např.:

$$\log BCF = \log K_{ow} - 1,32$$

## Příklad č. 2

Odhadněte maximální koncentraci 1,2,4-trichlorbenzenu (1,2,4-TCB) v těle pstruha, který žije ve vodě, která obsahuje 2,3 ppb 1,2,4-TCB. Výsledek uveďte v ppm.

$$\log K_{ow} (1,2,4\text{-TCB}, 25^\circ\text{C}) = 4,04$$



1,2,4-trichlorbenzen

# Rovnovážná distribuce látek

$$K_{12} = \frac{c_1}{c_2}$$

V systému se 2 fázemi je **frakce** látky v jedné fázi:

$$f_1 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} = \frac{c_1 \cdot V_1}{c_1 \cdot V_1 + c_2 \cdot V_2}$$

Platí:

$$f_1 + f_2 = 1$$

Po úpravě:

$$f_1 = \frac{1}{1 + \frac{c_2}{c_1} \cdot \frac{V_2}{V_1}} = \frac{1}{1 + \frac{1}{K_{12}} \cdot \frac{V_2}{V_1}}$$

# Rovnovážná distribuce látek

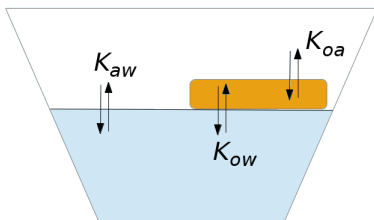
Obecně pro více než dvě fáze:

$$f_1 = \frac{1}{1 + \sum_{n=2}^n \frac{1}{K_{1n}} \cdot \frac{V_n}{V_1}}$$



## Příklad č. 3

Do polévkové mísy, která obsahovala  $1 \text{ dm}^3$  zředěného vývaru o teplotě  $25^\circ\text{C}$  s  $1 \text{ cm}^3$  tuku na povrchu, spadl krystalek naftalenu o hmotnosti  $1 \text{ mg}$ . Po zakrytí mísy víkem došlo k ustavení rovnováhy mezi vodnou fází, tukem a vzduchem, jehož objem byl  $1 \text{ dm}^3$ . Vypočtete, kolik naftalenu je rozpuštěno v tuku na povrchu.



$$\log K_{ow} = 3,36$$

$$\log K_{aw} = -1,76$$