

Chemie životního prostředí – seminář

Jaromír Literák

Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity

18. října 2018



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.

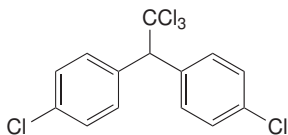
Rozdělovací koeficient oktanol-voda

Odhad log K_{ow} s využitím π -konstant (Fujita a Hansh).

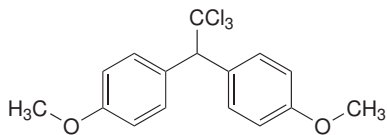
Funkční skupina	π -konstanta	Funkční skupina	π -konstanta
-NH ₂	-1,23	-F	0,14
-OH	-0,67	-N(CH ₃) ₂	0,18
-CN	-0,57	-CH ₃	0,56
-NO ₂	-0,28	-Cl	0,71
-COOH	-0,28	-Br	0,86
-OCH ₃	-0,02	-CH ₂ CH ₃	0,98
-H	0,00	-CH(CH ₃) ₂	1,35

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?

**A**

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

**B**

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

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.

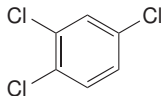
Empirické vztahy mezi K_{ow} a BCF , např.:

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

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:

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

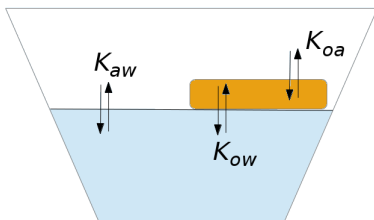
Rovnovážná distribuce látek

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

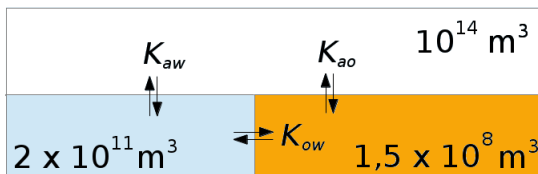


$$\log K_{ow} = 3,36$$

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

Příklad č. 4

Pomocí modelu, který předpokládá ustavení rovnováhy mezi vzduchem, vodou a půdou a sedimenty (jejich velikost naleznete na obrázku), odhadněte poločas života lindanu. Předpokládejte, že lindan zaniká ve všech třech prostředích reakcemi, které se řídí kinetikou pseudo-prvního řádu.



$$\log K_{aw} = -3,94$$

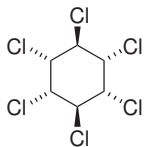
$$\log K_{ow} = 3,78$$

$$k_a = 0,1 \text{ den}^{-1}$$

$$k_w = 0,01 \text{ den}^{-1}$$

$$k_o = 0,0006 \text{ den}^{-1}$$

Příklad č. 4



lindan