

MUNI | RECETOX

Chemické látky v prostředí – základní definice a pojmy

Doc. Ing. Branislav Vrana, PhD.
branislav.vrana@recetox.muni.cz

RECETOX
Přírodovědecká fakulta
Masarykova univerzita
Brno, Česká republika



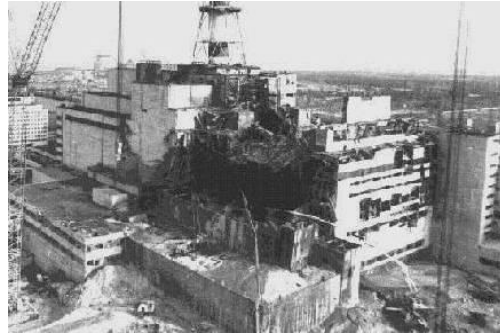
Chemické látky v prostředí – základní definice a pojmy

**Chemické látky
v prostředí –
základní pojmy a
definice**

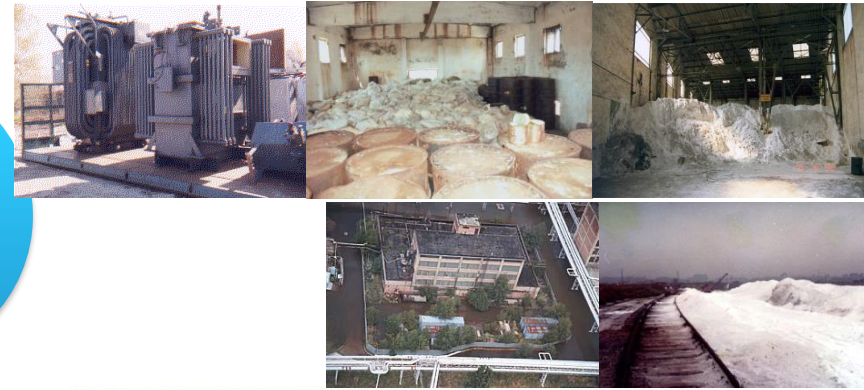
**Environmentálně
nebezpečné
chemické látky**

**Osud
chemických
látek v prostředí**

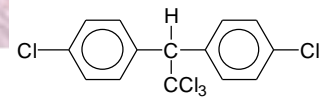
Chemické látky v prostředí



Vstup do prostředí

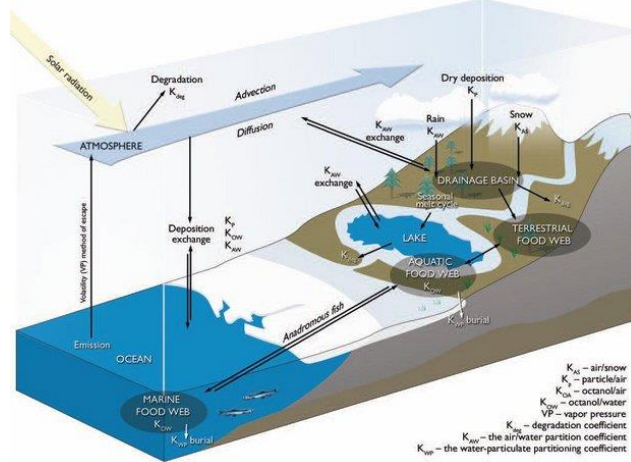
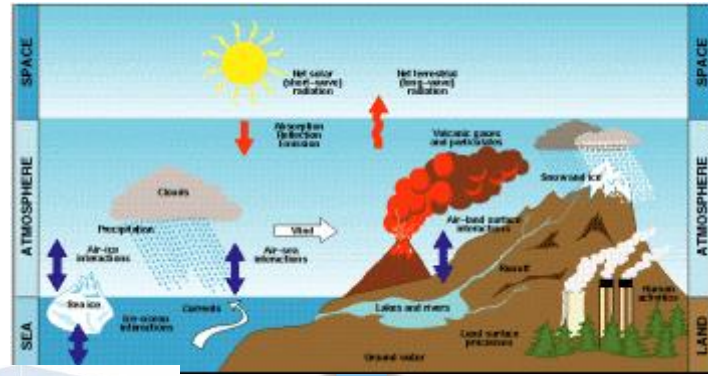


Chemická látka



RECETOX

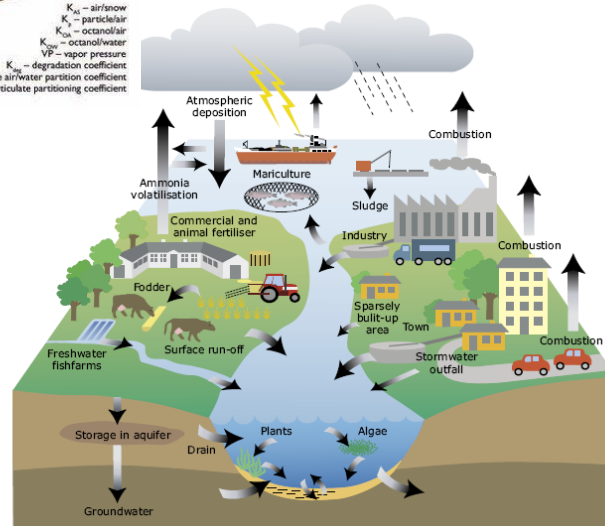
Chemické látky v prostředí



Chemická látka

Osud v prostředí

K_{as} - air/snow
 K_{pa} - particle/air
 K_{oa} - octanol/air
 K_{ow} - octanol/water
 VP - vapor pressure
 K_{deg} - degradation coefficient
 K_{ow} - the air/water partition coefficient
 K_{wp} - the water-particulate partitioning coefficient



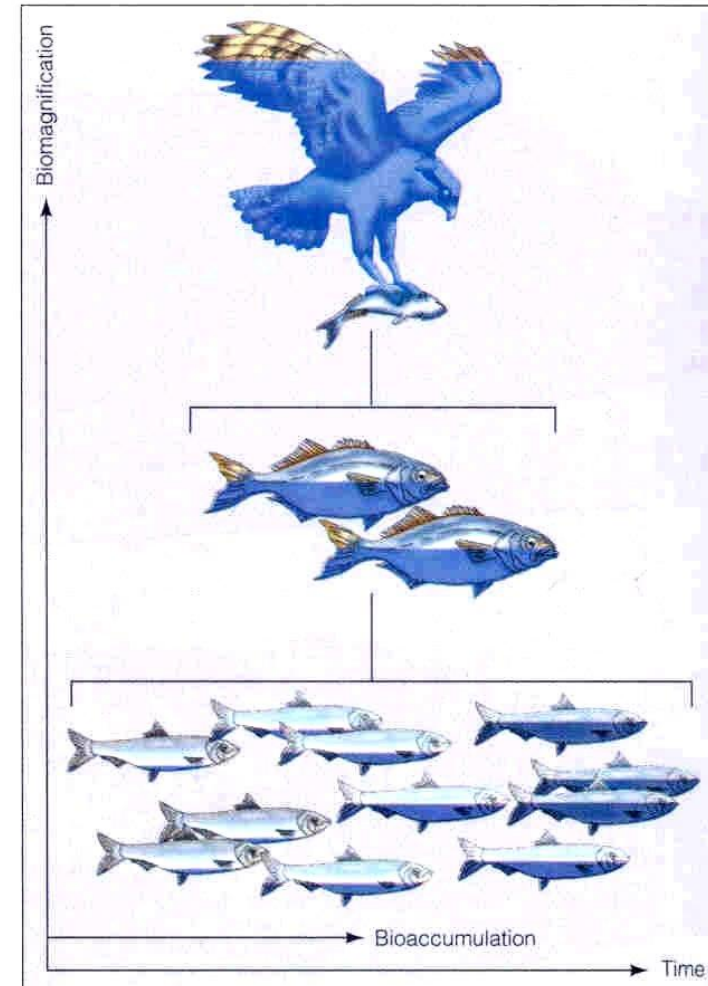
Chování kontaminantů v prostředí

Kontaminanty mohou vstupovat do životního prostředí mnoha cestami. Jejich další chování závisí na mnoha faktorech:

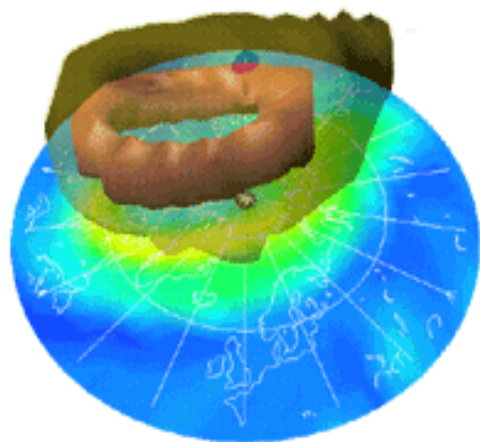
- ↻ Rychlost rozkladu
- ↻ Doba zdržení v daném rezervoáru
- ↻ Mechanismus transportu
- ↻ Interakce s dalšími kontaminanty a látkami

Rozpad a rozklad:

- ↻ Chemická stabilita
- ↻ Biodegradace
- ↻ Persistentní látky – ^{239}Pu : poločas rozpadu 24 000 let
- ↻ Biokoncentrace - DDT



Chemické látky v prostředí



Chemické látky v prostředí

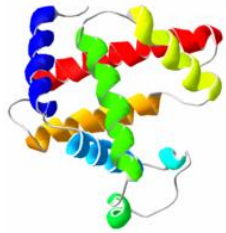


Účinek
na živé
organism
y

Chemick
á látka



Damir Sagolj / Reuters



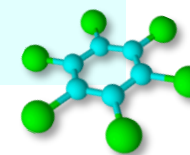
Holland America



Copyright 2004



Toxikologicky významné látky kolem nás



Pesticidy



Zplodiny
spalovacích
procesů



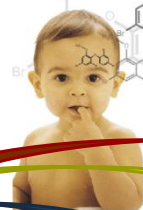
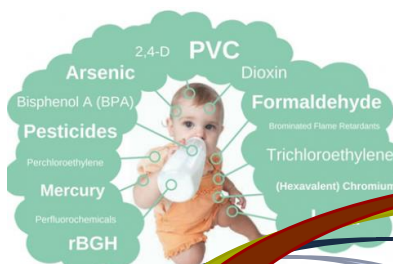
Prostředky
osobní péče
(PCP)



Obaly



Odpady



Těhotenství



Expozice

Dětství



Puberta



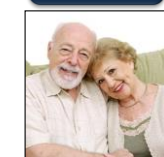
Reprodukční
věk



Střední
věk



Stáří



Celoživotní expozice



SHAMPOO
Average number of chemicals: 15

SUNSCREENS
EYE SHADOW
Chemicals: 26

LIPSTICK
Chemicals: 33

BODY LOTION
Chemicals: 32

DEODORANT
Chemicals: 15

BLUSH
Chemicals: 16

FAKE TAN
Chemicals: 22

Výskyt v prostředí = potenciální možnost transferu do lidského organismu.
Je nutné stanovovat celoživotní expozici včetně prenatálního období.
Vlivy na zdraví se mohou projevit v pozdějším věku.

The Chemical Universe

Potenciální chemický vesmír

Známé látky – více než 120 000 000 chemických látek

Potenciálně existující látky

- ↪ existující a identifikované chemické látky
- ↪ existující a ještě neidentifikované chemické látky
- ↪ látky, které by mohly být potenciálně syntetizovány a přidány ke známému, stále se rozšiřujícímu množství již existujících látek
 10^{60} látek (C, N, O, S)
- ↪ rozšíření na další heteroatomy (například P a halogeny), množství možných struktur přesahuje naši představivost

The Chemical Universe

Známý chemický vesmír

Známé látky:

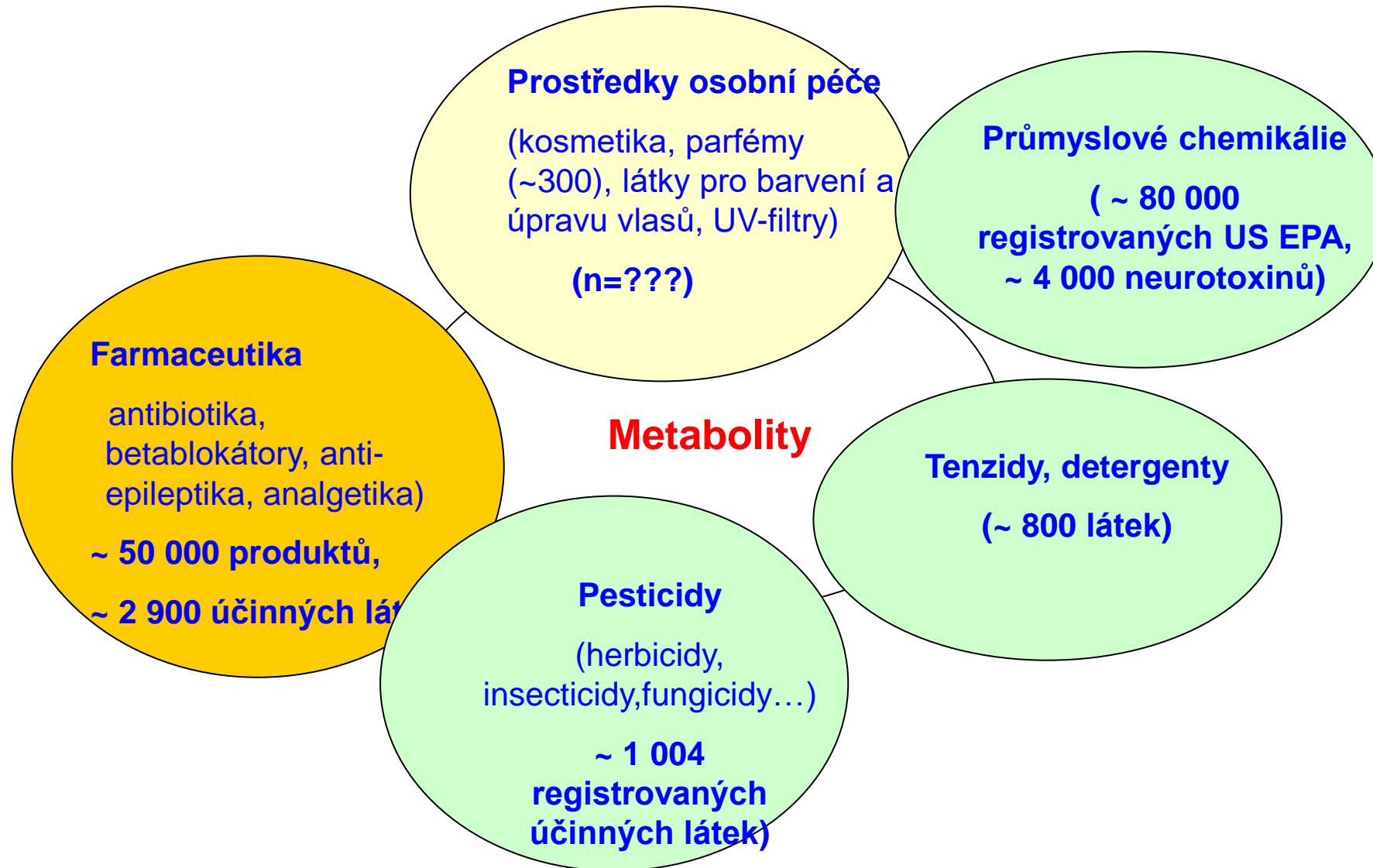
- ↪ Více než **120 milionů** chemických látek (org. + anorg.)
- ↪ Více než **62 milionů** sekvencí
- ↪ Indexovány v CAS Registry
- ↪ **ca 12 000 látek !!!** denně

Komerčně dostupné látky - ca 14 milionů

ca 250 000 látek bylo/je celosvětově regulováno

To je pouze 1.8 % z komerčně dostupných látek a méně než 0.5 % ze známého množství chemických látek

Chemické látky v prostředí



Chemické látky v prostředí

Průmyslové chemikálie

Zemědělské chemikálie

Polutanty globálního dopadu – CFCs, POPs, těžké kovy, radionuklidy, částice

Farmaceutika a prostředky osobní péče

Látky modulující endokrinní systém

Metabolity, degradační produkty

Částice, nanočástice

Vybrané problémy chemického znečištění prostředí

Ovzduší:

- Znečištění městského ovzduší
- Regionální znečištění ovzduší včetně kyselých depozic
- Nebezpečné nebo toxické vzdušné polutanty
- Radon ve vnitřním prostředí
- Znečištění vnitřního prostředí jiné než radon
- Radiace jiná než radon
- Narušení ozónové vrstvy (freony, NO...)
- Globální klimatické změny (CO₂, freony, CH₄, N₂O)



Vybrané problémy chemického znečištění prostředí

Voda:

- Vypouštění průmyslových odpadních vod z bodových a plošných zdrojů do povrchových vod
- Kontaminovaný kal
- Znečištění moří a oceánů z různých zdrojů
- Znečištění mokřadů
- Znečištění pitné vody chemicky, biologicky, radiačně
- Znečištění podzemních vod průsakem ze skládek, septiků, splachem ze silnic, vrtů, podzemních nádrží
- Nehody vedoucí ke kontaminaci vod
- Ropné znečištění hydrosféry



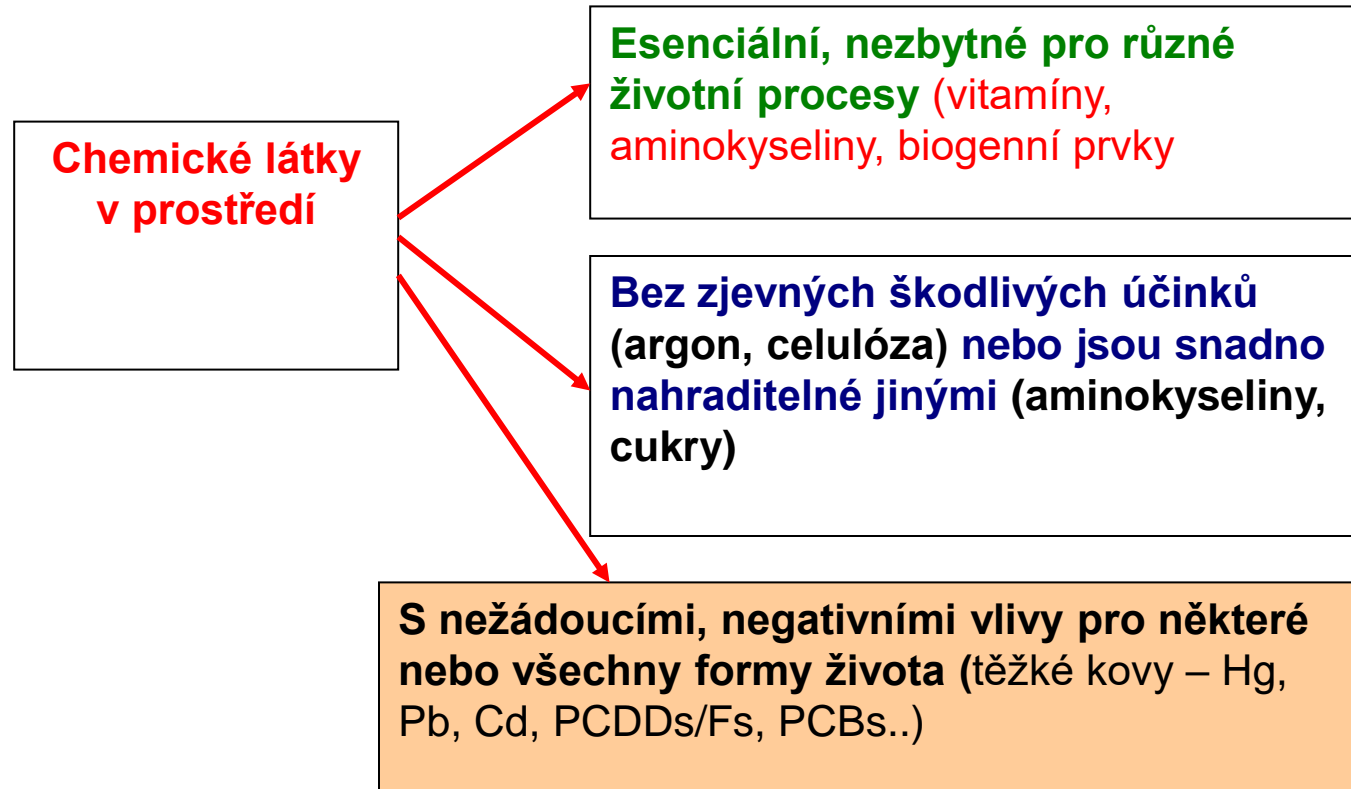
Vybrané problémy chemického znečištění prostředí

Půda:

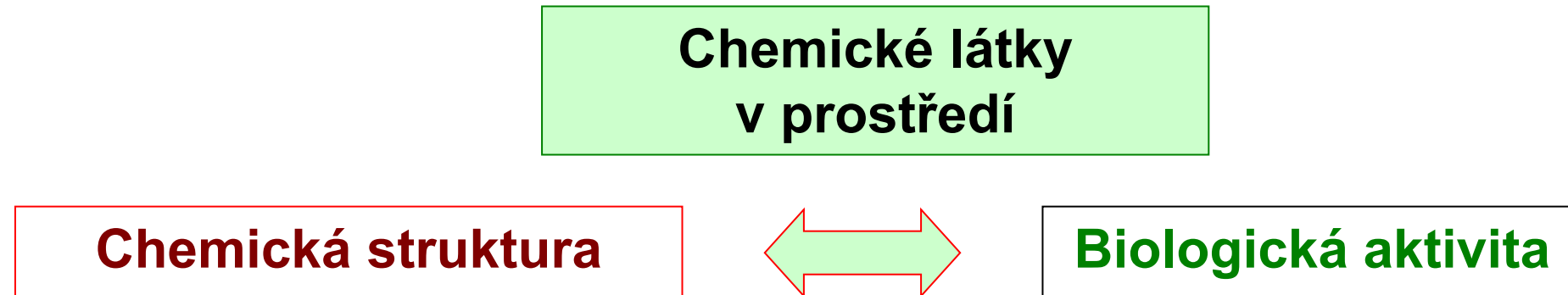


- **Používání pesticidů a dalších agrochemikálií**
- **Spad z atmosféry**
- **Používání kontaminované vody k závlahám**
- **Používání kontaminovaných kalů z ČOV**
- **Nové toxické chemikálie**
- **Geneticky modifikované organismy**

Chemické látky - > 120 000 000



Hodnocení výskytu chemických látek v prostředí



**Co znamená přítomnost chemických látek
v prostředí pro živé organismy ?**

**Riziko spojené s jejich přítomností –
akutní, chronické**

Definice, základní pojmy

Škodlivina / polutant

Chemická látka přítomná v prostředí v koncentraci vyšší než je přírodní jako důsledek lidské aktivity a mající široké, nežádoucí vlivy na prostředí

Cizorodá látka / xenobiotikum

Sloučeniny antropogenního původu, přírodě cizí

Jed

Všechny látky jsou jedy, nic není bez jedovatých vlastností. Je to pouze dávka, která činí z látky jed.

Paracelsus, 1493 – 1541

Sekundární toxicita



Antropogenní látky v prostředí

Od průmyslové revoluce

nárůst koncentrací antropogenních chemických látek v prostředí
[man-made chemicals]

Proč ??

Populační exploze
Zemědělství
Průmysl
Válečné konflikty



Kontaminace vs. znečištění

- **Kontaminace** = chemická(é) látka(y) jsou přítomny v koncentracích vyšších je přírodní pozadí
- **Znečištění** = chemická(é) látka(y) jsou přítomny v koncentracích způsobujících negativní dopad



POLLUTANT VERSUS CONTAMINANT

Pollutant is a harmful or poisonous substance that pollutes something.

Contaminant is a foreign substance or impurity that contaminates something.

Pollutants always create harmful effects.

Contaminants do not always create harmful effects.

Pollutants can be either foreign substances or a component of the original substance that has exceeded the harmless level.

Contaminants usually refer to foreign matter that are introduced from the outside.

Pediaa.com

Co je škodlivé ?



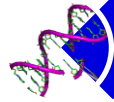
Smrt



Vážné poškození



Vážné onemocnění



Genetické mutace



Vrozené vady



Snížení obranyschopnosti



Neurotoxicita

Znečištění

Kontaminace:

- Nevykazue škodlivé účinky

Znečištění:

- Škodlivé účinky jsou přítomny

Mohou to být stejné chemické látky, záviset bude na:

- Koncentraci
- Organismu
- Přítomnosti dalších látek

Typy polutantů

Primární polutanty

- Nebezpečné v původní podobě
- Látky primárně vstupující do prostředí z určitých zdrojů (bodových, plošných, difuzních)

Sekundární polutanty

- Mohou být nebezpečnější než primární
- V jednotlivých složkách prostředí vznikají přeměnou látek primárně emitovaných
 - biologické procesy
 - chemické reakce



Definice, základní pojmy

Toxicita (toxicity)

- schopnost látky poškozovat živý organismus, je dána jejími fyzikálně-chemickými vlastnostmi

Expozice (exposure)

- proces, při kterém organismus přichází do styku s látkou a při kterém lze předpokládat přestoupení hranice organismu.
- expoziční cesty (inhalační, perorální, dermální..)

Definice, základní pojmy

Dávka (dose)

- množství látky vstupující do organismu během expozice vztažené na jednotku tělesné hmotnosti a jednotku času (např. $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$)

Účinek (effect)

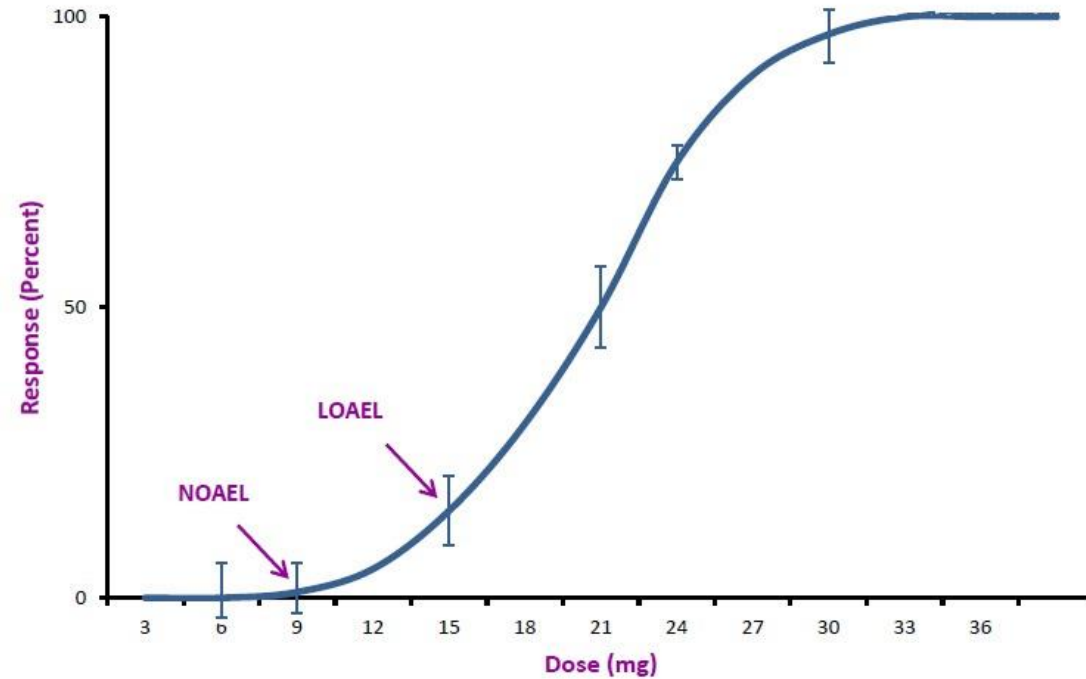
- Výsledek interakce chemické látky s živým organismem
- kvalitativní pojem (hepatotoxický, genotoxický...)

Odpověď (response)

- měřitelná míra téhož (změna aktivity některého jaterního enzymu..)

Vztah dávka – účinek (dose - response curve)

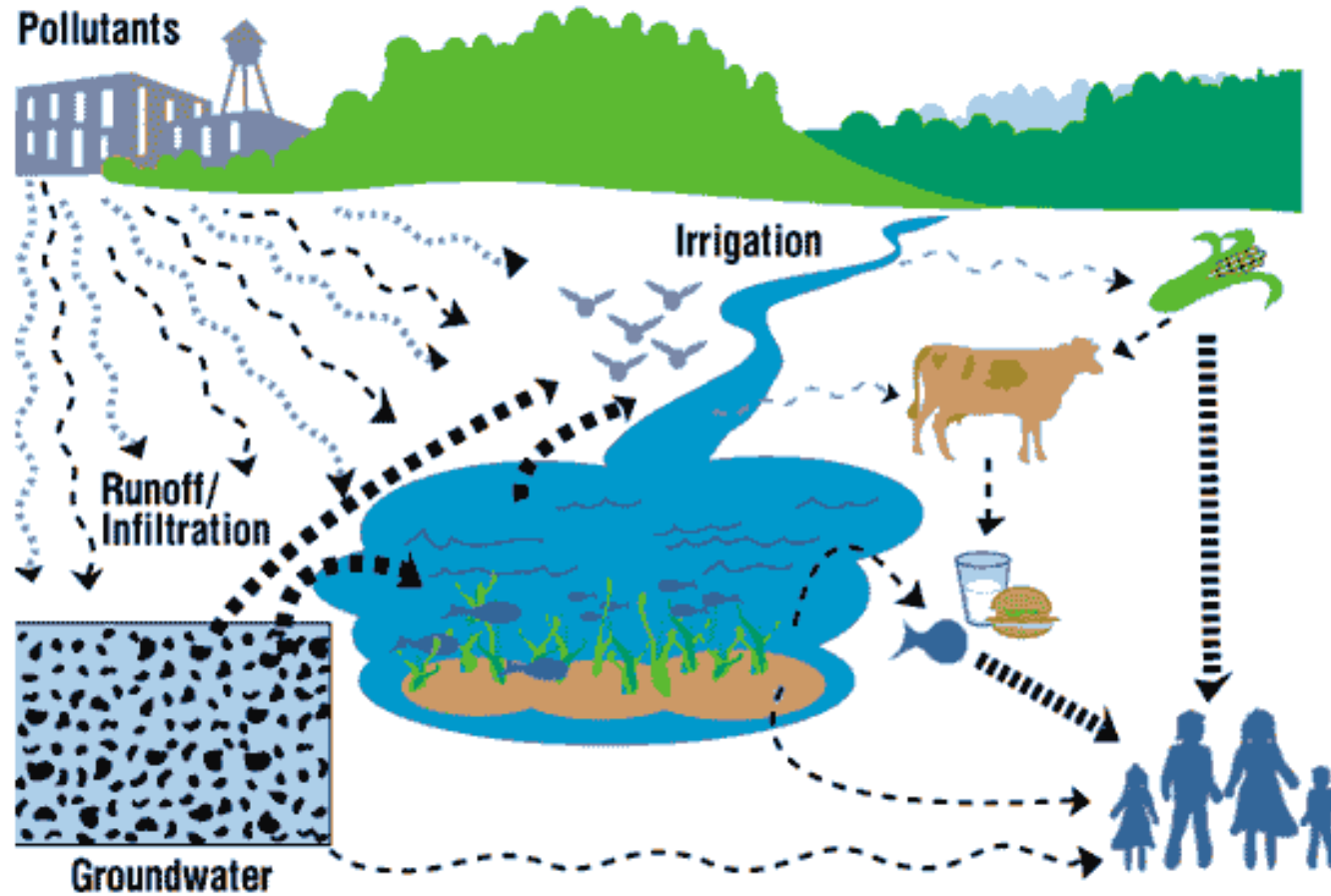
Křivka dávka - odpověď



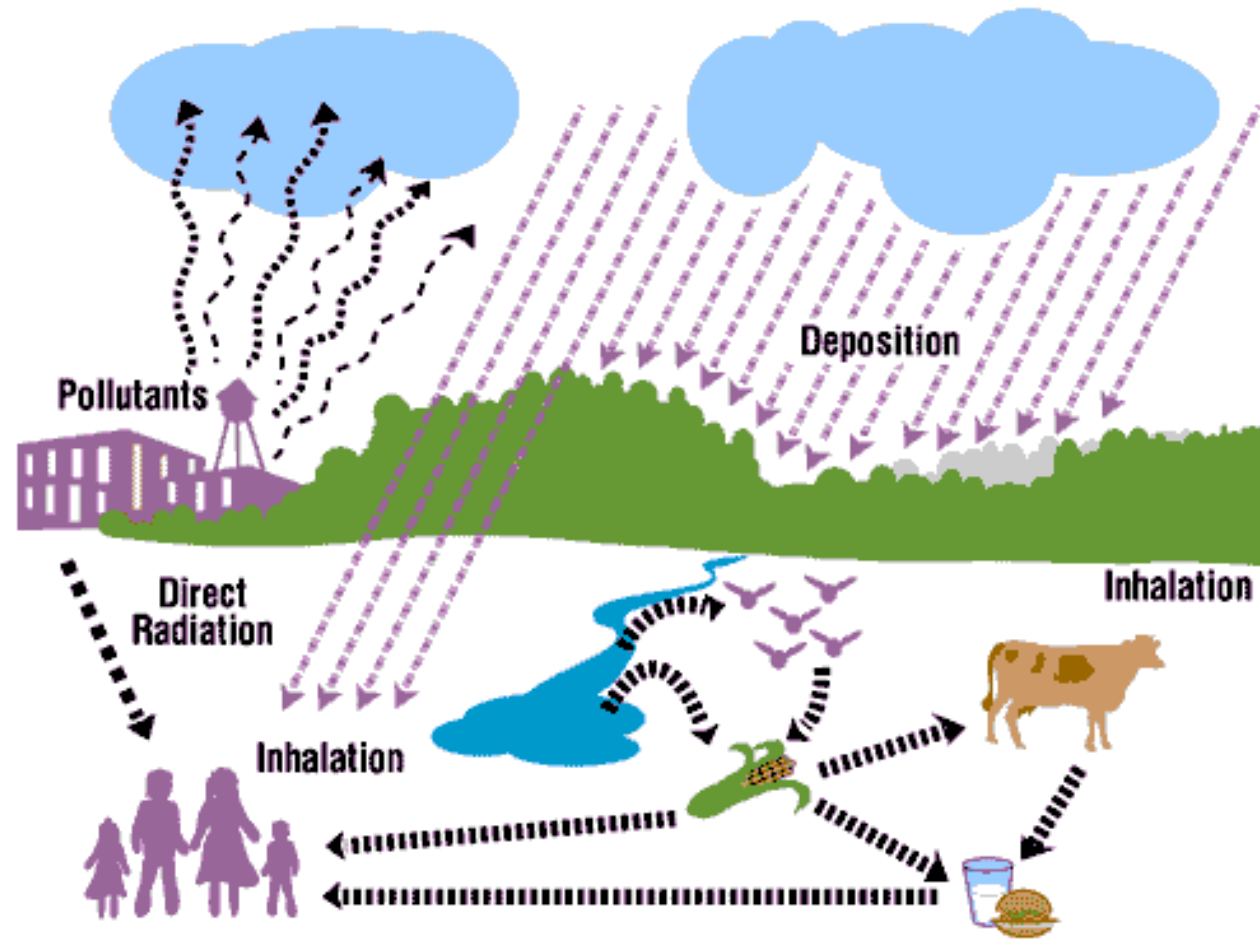
NOAEL: Je to nejvyšší (dávka), při které nebyl zjištěn žádný pozorovaný nepříznivý účinek.

LOAEL: Je to nejnižší dávka, při které byl zjištěn pozorovaný škodlivý účinek

Expozice



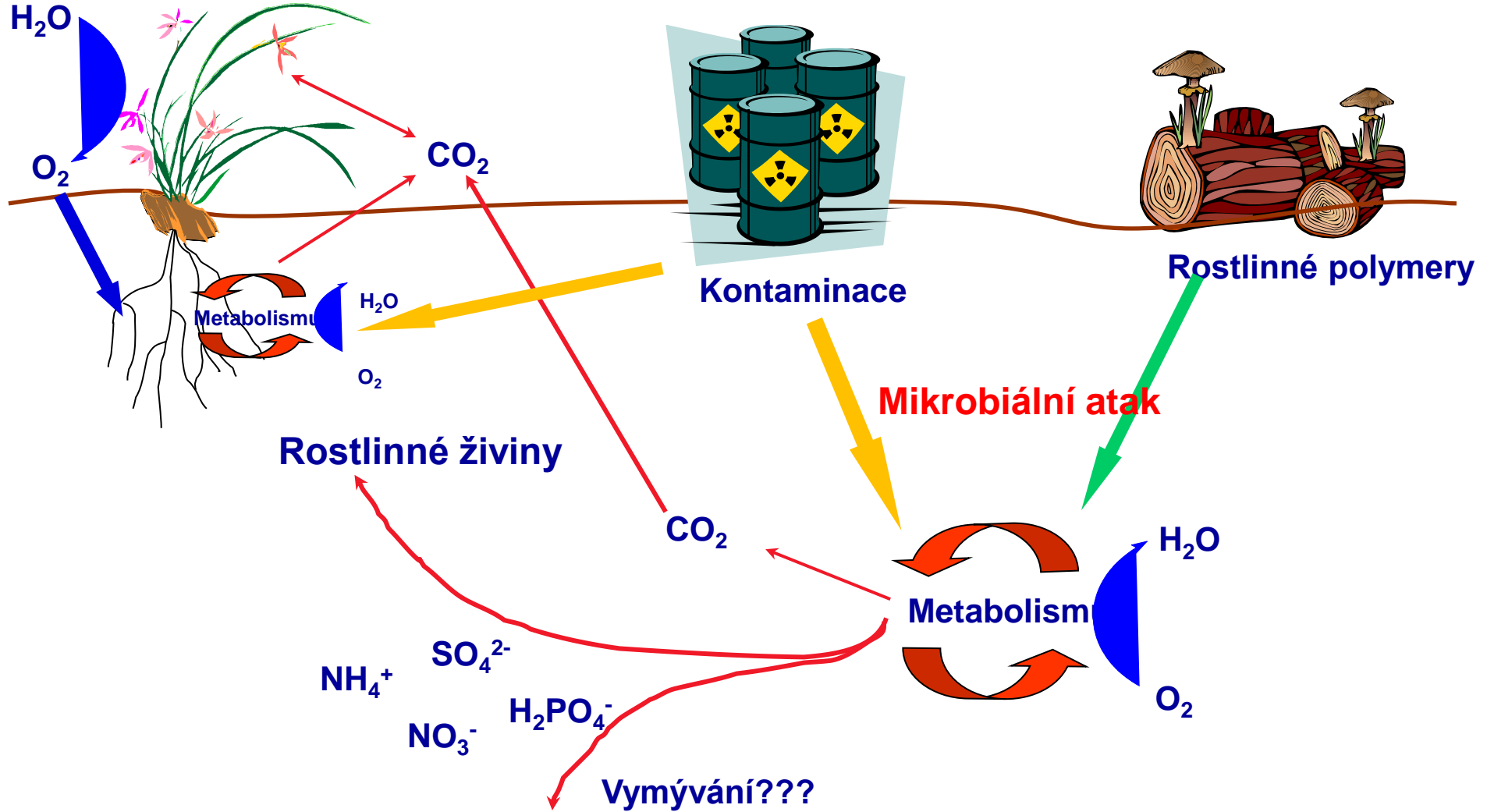
Expozice



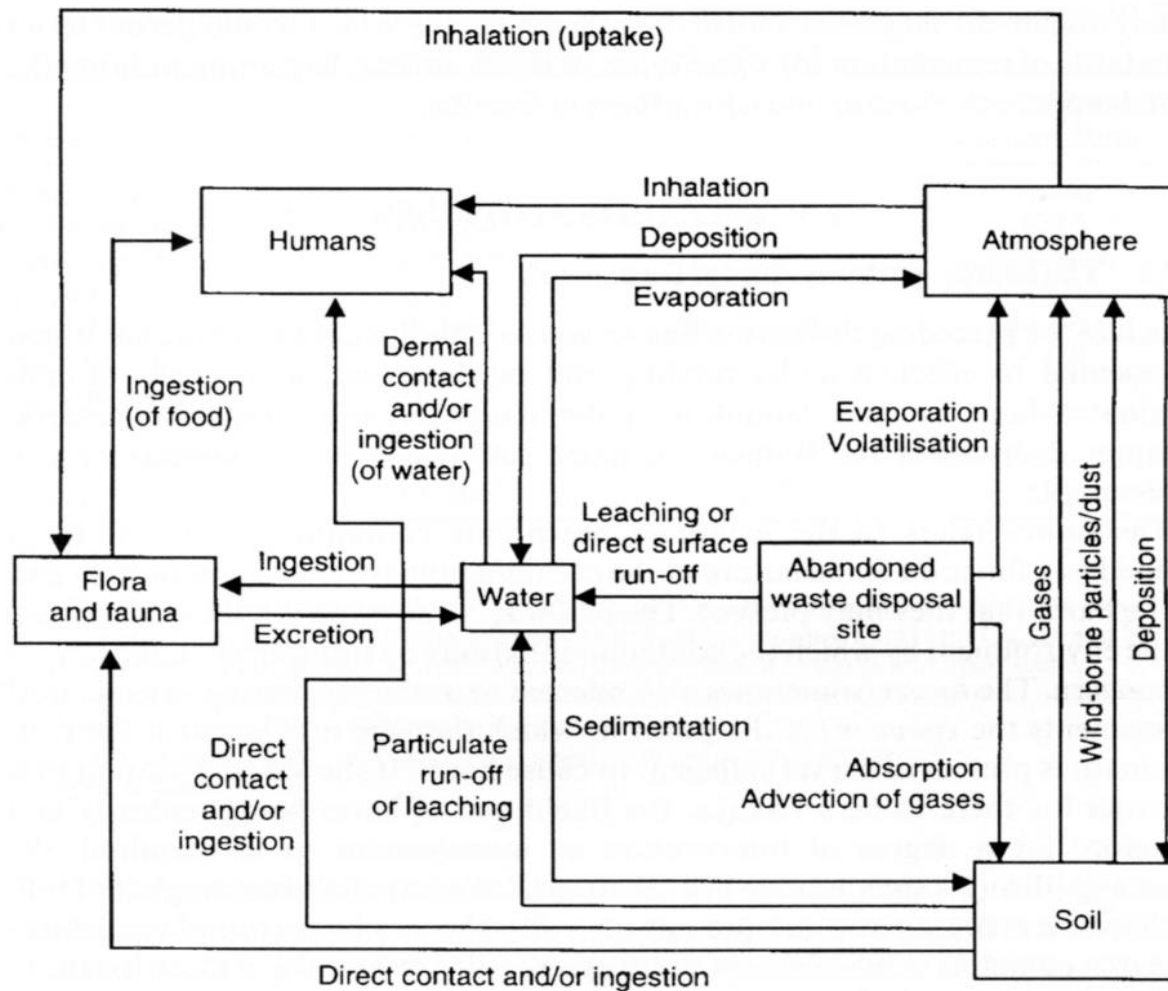
Cyklus kontaminantů



Energie



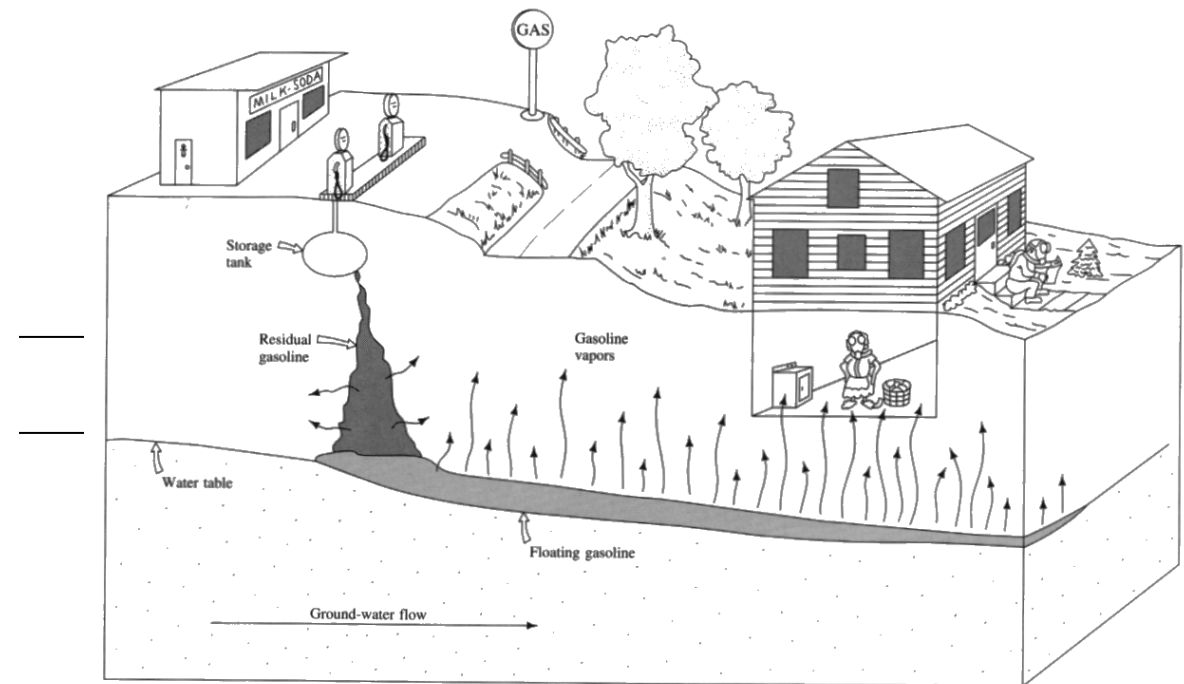
Cesty kontaminace a expozice



Fyzikální, chemické a biologické mechanismy řídící migraci polutantů

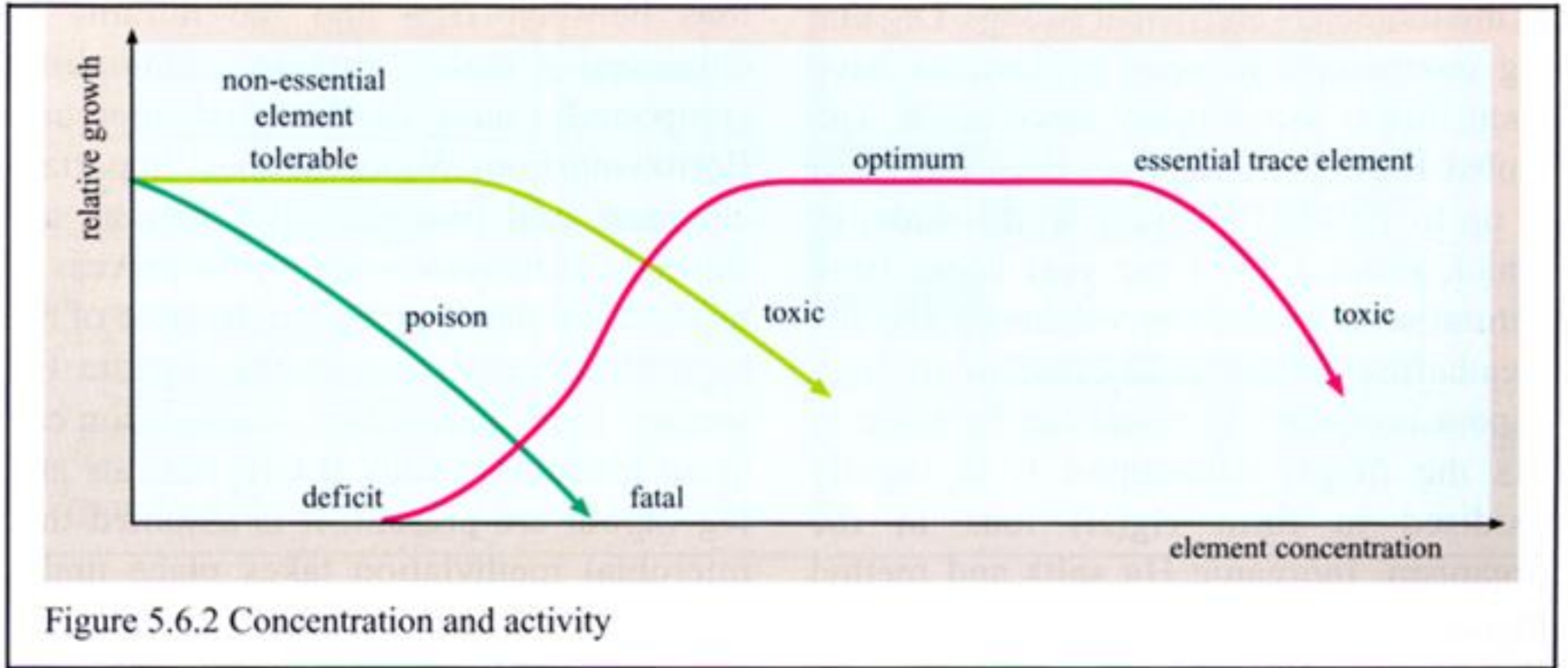
Příklady:

- Vstupy chemických látek z půd (vymývání)
- Transport vodou v nasycených a nenasycených půdních zónách
- Tok volné fáze (LNAPL migrace)
- Sorpce
- Biodegradace



[C.W.Fetter, 1999]

Koncentrace a účinky



akutní

– expozice vysokou koncentrací toxické látky



chronický

– opakovaná, dlouhodobá expozice relativně nízkými koncentracemi



genotoxický

– ovlivnění genetické informace (mutagenní, teratogenní, karcinogenní)



Hodnocení rizik

Expozice

Účinky



Laboratorní (a terénní) studie

Testy ekotoxicity

Předpovídaná expoziční koncentrace (PEC)

Předpovídaná koncentrace bez účinku (PNEC)

Persistence

Environmentální persistence – představuje odolnost látky vůči rozkladu – chemickému, fotochemickému, termickému, biochemickému – charakterizuje dobu setrvání (života) chemické látky v prostředí.



Nejčastěji se vyjadřuje pomocí **poločasu života** ($t_{1/2}$), tedy doby, kdy koncentrace sledované látky klesne na polovinu původní hodnoty v dané složce prostředí.

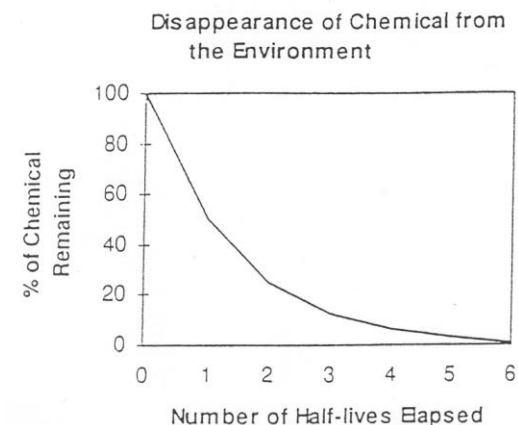
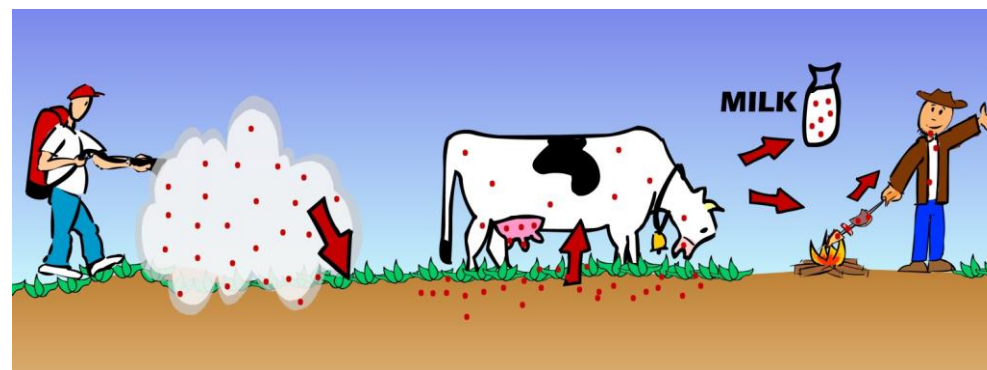
Persistence

Persistence za daných environmentálních podmínek závisí na:

vlastnosti dané sloučeniny

vlastnosti dané složky prostředí

- intenzita slunečního světla
- koncentrace hydroxylových radikálů
- složení mikrobiálních společenstev
- teplota...



Biodostupnost



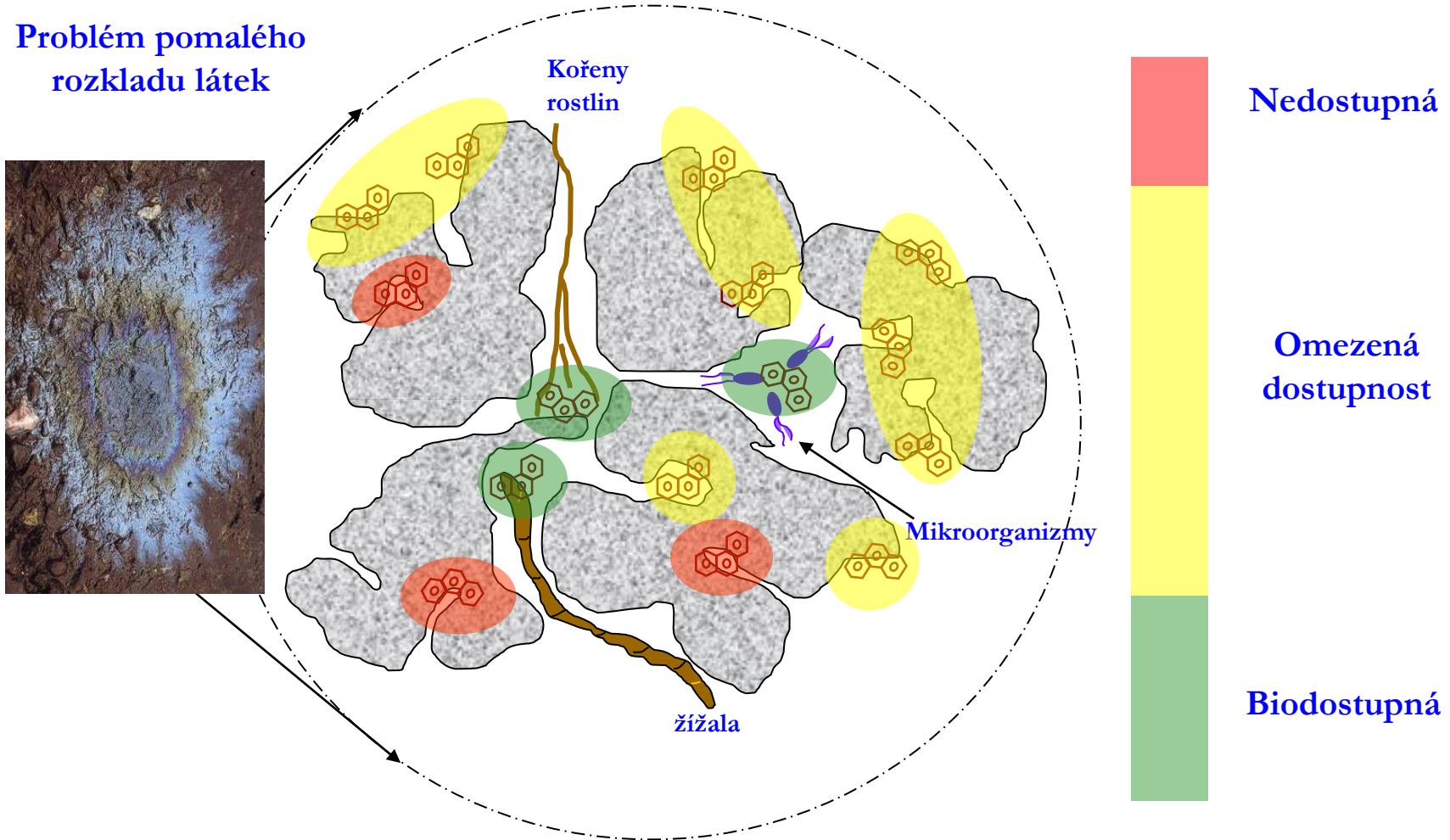
Biodostupnost (bioavailability) – chemická látka je biodostupná, když může být přijímána organismem z okolního prostředí (voda, sedimenty, půdy, potrava..).



Je funkcí vlastnosti dané sloučeniny (forma výskytu, polarita, rozpustnost ve vodě..) a fyzikálních a chemických vlastností prostředí, ve kterém se nachází (sorpce..).

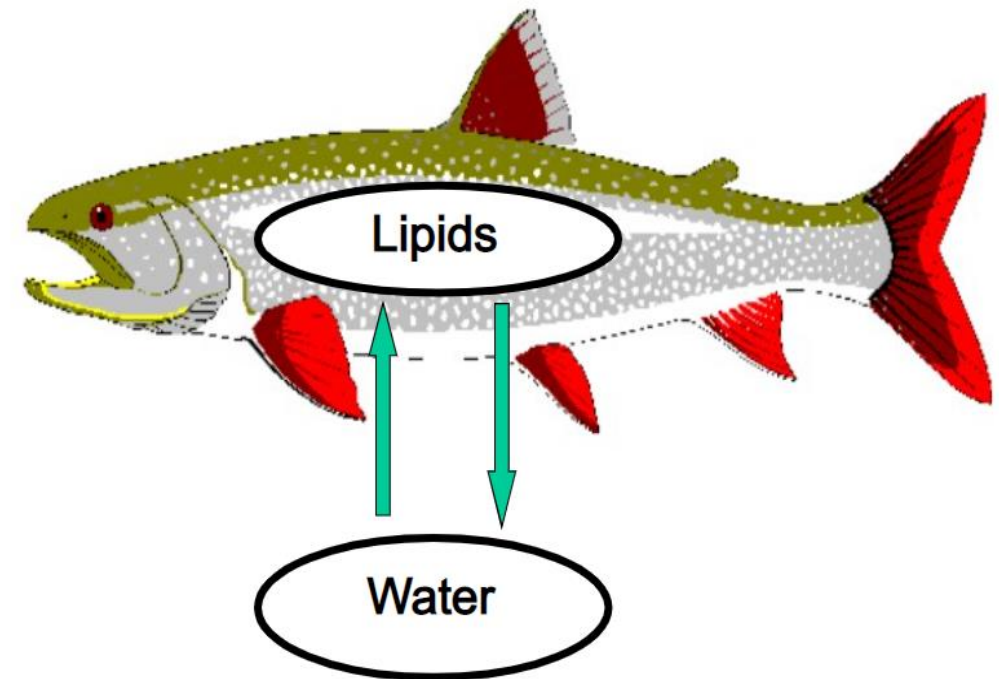


Omezená biodostupnost hydrofóbních organických látek



Biokoncentrace

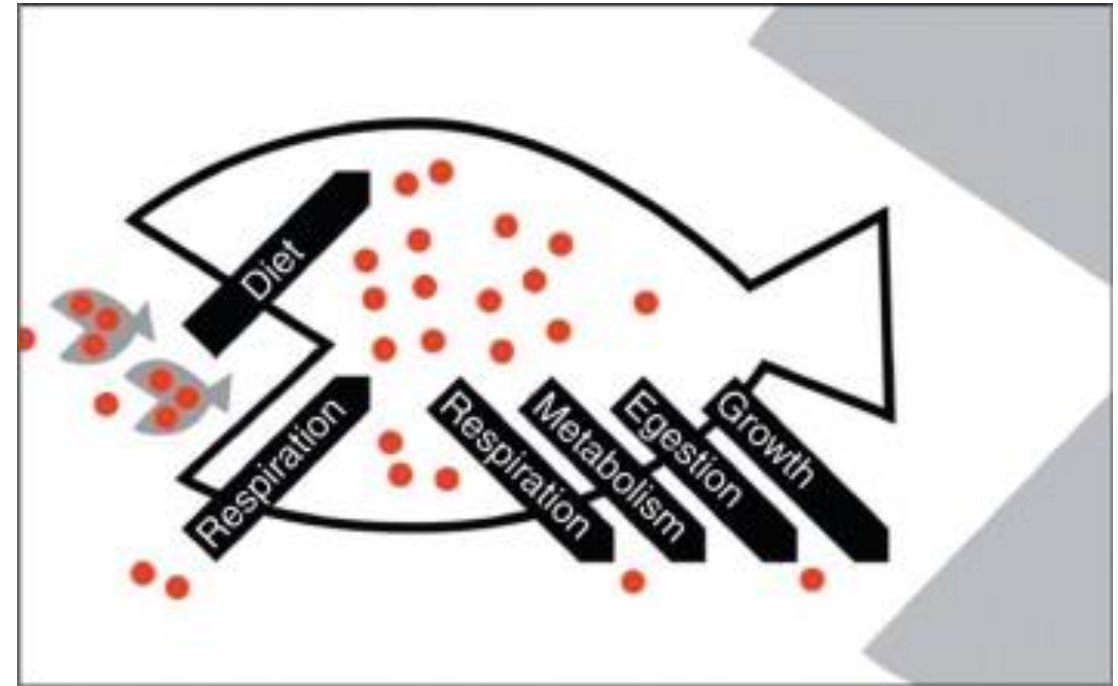
(bioconcentration) – je proces, během kterého dochází k akumulaci chemické látky přímo ze zevního prostředí do živého organismu jako výsledku simultánního příjmu a vylučování.



Biokoncentrace

Bioakumulace

proces, během kterého jsou chemické látky akumulovány organizmy přímo z okolního média nebo prostřednictvím kontaminované potravy.



Biokoncentrace

Bioakumulace

Bioakumulace (bioaccumulation)

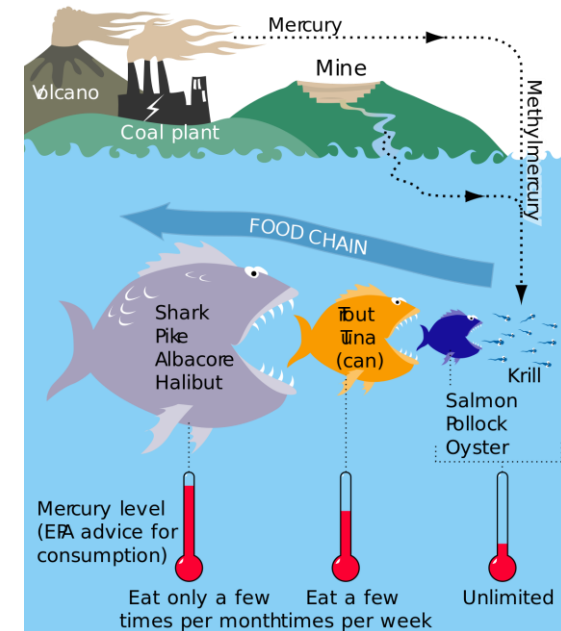
- Je proces, během kterého jsou chemické látky akumulovány organismy přímo z okolního média (biokoncentrace) nebo/a prostřednictvím potravy kontaminované těmito sloučeninami (bioobohacování).

Bioakumulace

- biokoncentrace + bioobohacování

Bioakumulace, biokoncentrace i bioobohacování,

- procesy vedoucí k nahromadění látky v organismu jsou výsledkem procesu daného příjmu a eliminace látky.

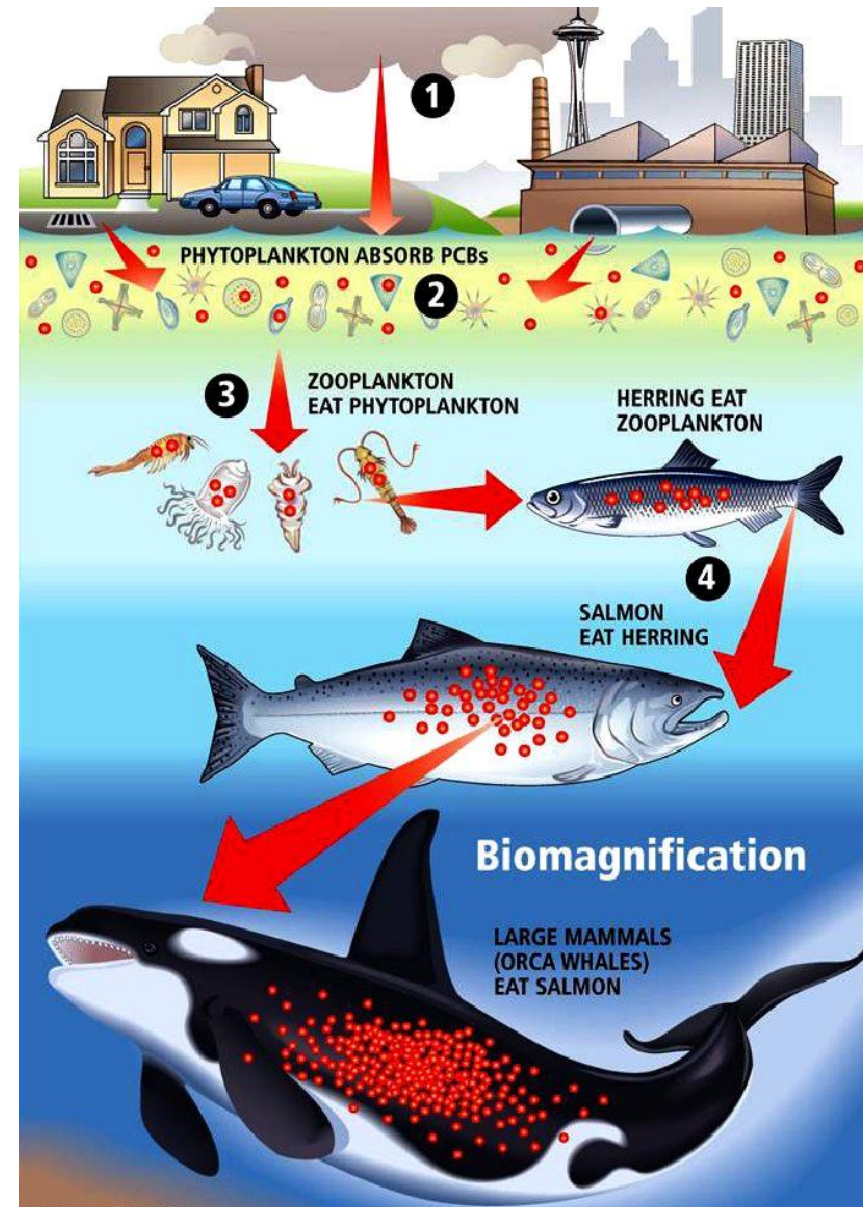


Bioobohacování

Bioobohacování (biomagnification) – tento proces popisuje transfer látky z potravy do konsumenta tak, jak residuální koncentrace narůstají z jedné trofické úrovně do další.

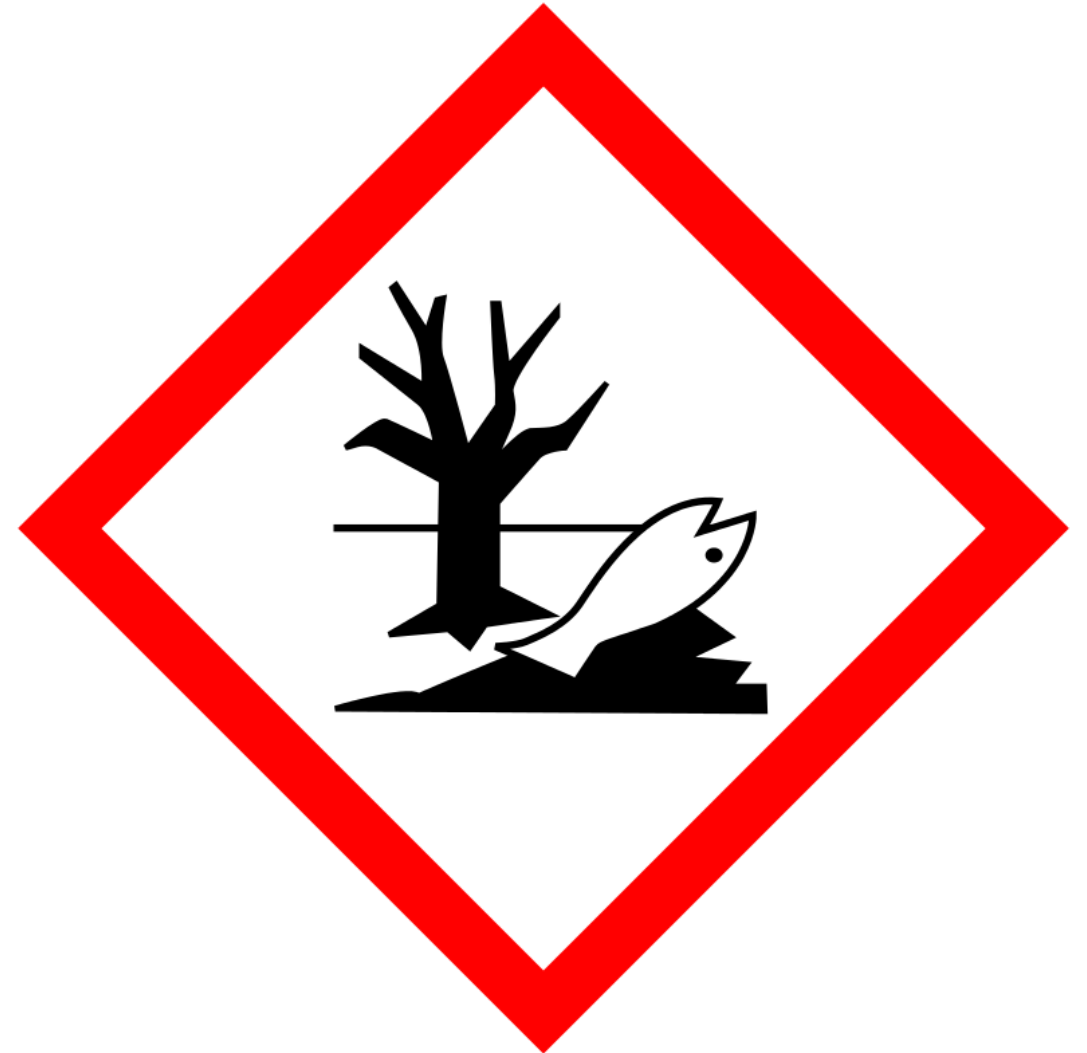
Bioobohacování je ovlivňováno řadou faktorů:

- vlastnostmi bioakumulované sloučeniny
- počtem trofických úrovní,
- druhem organismů tvořících potravní řetězce,
- schopností organismu metabolizovat danou látku
- koncentrací látky na každé úrovni



Environmentálně nebezpečná chemická látka

Chemický prvek nebo sloučenina, které mohou být nebezpečné přírodnímu prostředí již v malých koncentracích, protože jsou toxické, mohou být odolné vůči různým formám rozkladu, mají tendenci ke kumulaci v abiotických i biotických složkách prostředí.

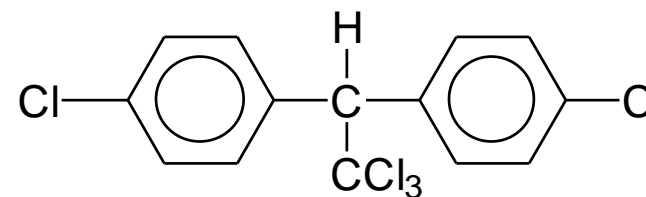
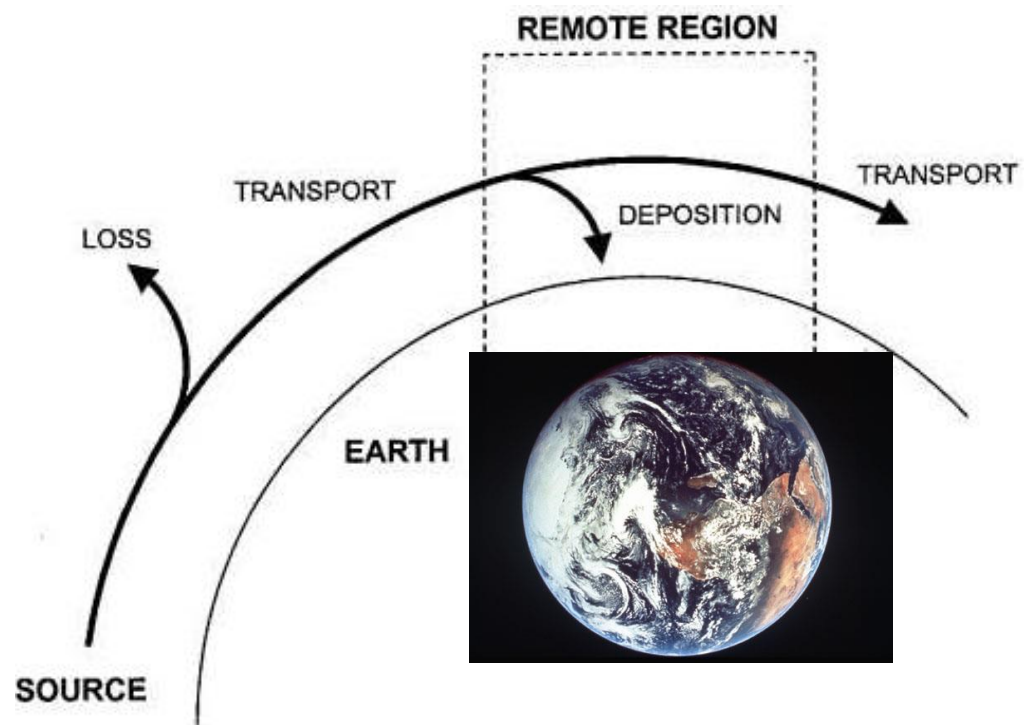


Environmentálně nebezpečná chemická látka

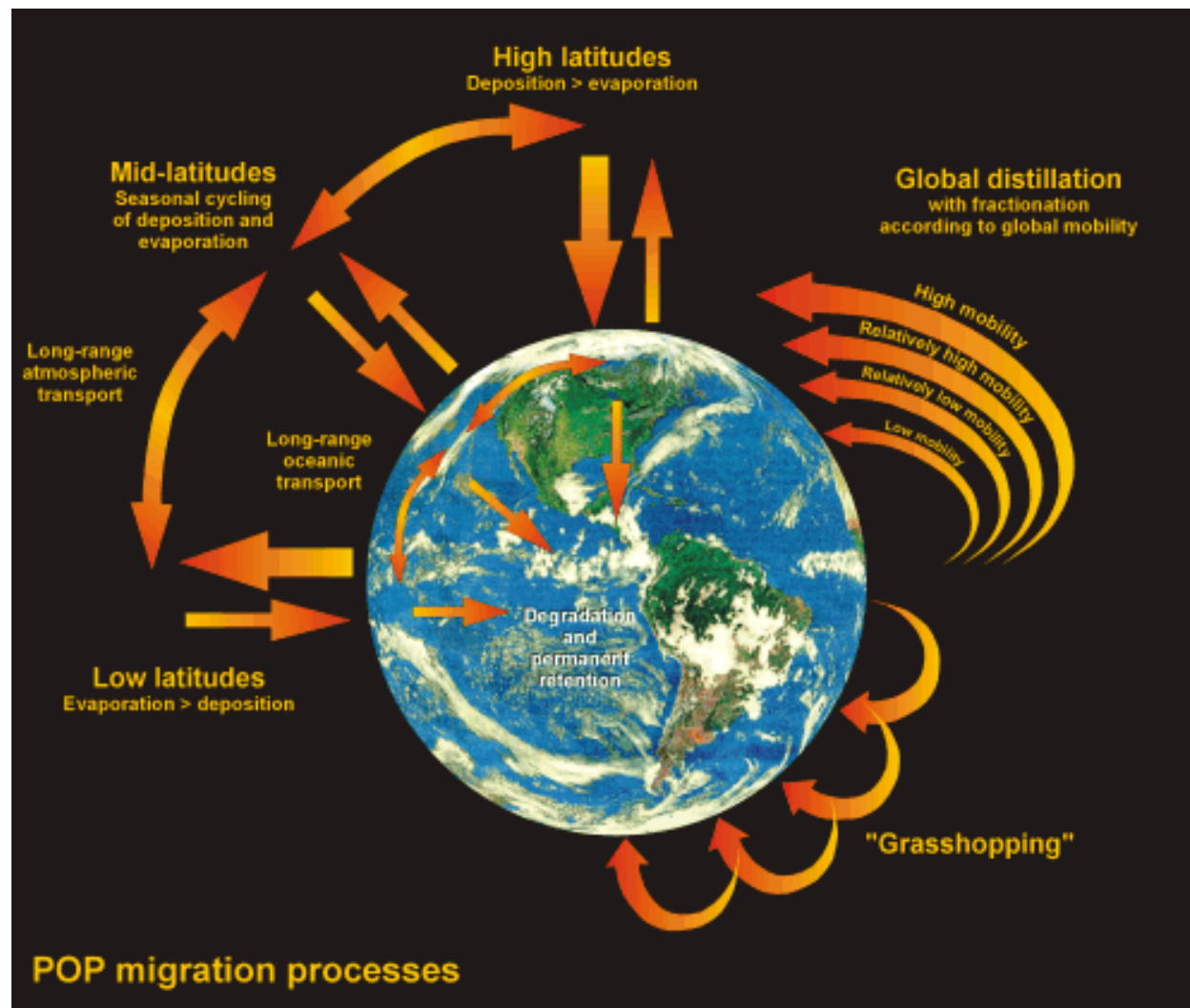
Nejproblematictější vlastnosti z hlediska možného nebezpečí pro životní prostředí:

- toxicita
- persistence
- schopnost kumulace a bioakumulace
- schopnost dálkového transportu
- produkce v určitém množství
- určitá environmentální hladina

Globální transport



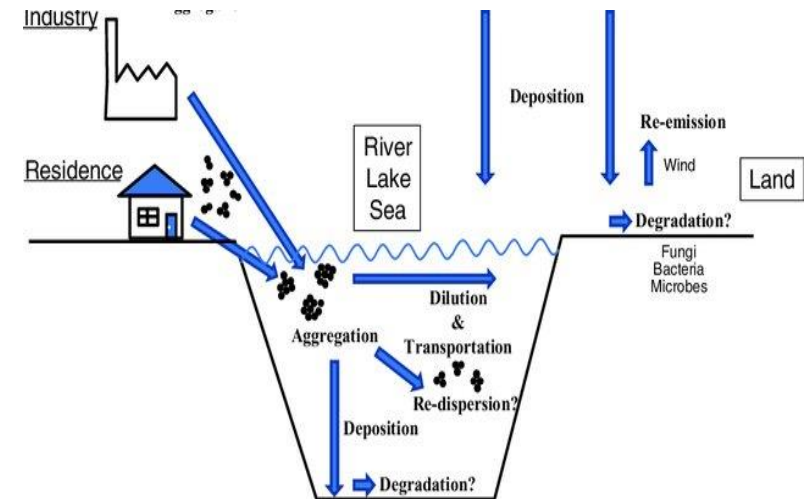
Globální transport



Osud chemické látky v prostředí

Osud (fate) chemické látky v prostředí zahrnuje:

- vstup do jednotlivých složek prostředí během produkce a spotřeby
- transport danou složkou prostředí, event. kumulace v této složce
- přechod do jiné složky prostředí přes mezifázové rozhraní
- transport novou složkou a další přechody – koloběh prostředí
- chemické, biochemické, fotochemické, termické reakce v prostředí, vznik metabolitů a reakčních produktů vedoucích k sekundárnímu znečištění



Biodegradace

Příznivé podmínky prostředí



Mikrobiální aktivity



**Degradace přítomných
Přírodních látek**

Nepříznivé podmínky prostředí



**Akumulace
Rašelinové půdy
Uhlí
Surová ropa**

(Znečištění ???)

Degradace přírodních látek

Proč

??



Evoluce biopolymerů a organických látek



Velmi pomalý proces



Paralelní evoluce mikrobiálního katabolismu



Miliardy let

Distribuce chemických látek v prostředí

Výsledkem je všudypřítomnost chemických látek v prostředí, jejich koloběh prostředím, možný globální výskyt a možné vlivy na organismy, jejich populace, společenstva a ekosystémy

