

Modelling and Interpretation of Environmental Data





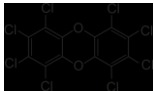
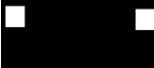
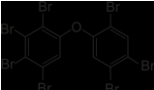
Cvičení #4/1

Hodnocení perzistence organických sloučenin

Stáhněte si a nainstalujte program EpiSuite z webových stránek US EPA:

<https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suite-tm-estimation-program-interface>

Chemické sloučeniny z Tab 1. aplikujte v modulu BIOWIN (použijte CAS čísla jako vstup).

Tab 1. CAS čísla a příslušné rozdělovací koeficienty				
chemical		CAS no.	log K_{AW}	log K_{ow}
<i>n</i> -hexane		110-54-3	1.87	3.90
cyclohexane		110-82-7	0.79	3.44
<i>p</i> -xylene		106-42-3	-0.55	3.15
1,4-dichlorobenzene		106-46-7	-1.01	3.44
octachlorodibenzo- <i>p</i> -dioxin (OCDD)		3268-87-9	-3.06	7.57
2,2',3,3',4,5,5',6'-octachlorobiphenyl (PCB 199)		52663-75-9	-3.39	8.91
octabromodiphenylether (octa-BDE)		32536-52-0	-4.60	10.17

Úkol 1: Převeďte BIOWIN3 a BIOWIN4 “scores” na poločasy života pomocí krokové funkce z Fig 1. Numerické hodnoty krokové funkce jsou v Tab 2. ((viz. Aronson *et al.* (2006): v tabulce 4, pravý sloupec).

Použijte template. Vykreslete 14 bodů do jednoho grafu (7 bodů BIOWIN3 score a příslušné $\log t_{1/2}$; stejným způsobem pro BIOWIN4), proložte přímkou $\log_{10}(t_{1/2}) = -0.8 \cdot \text{score} + 3.51$ (viz. Stempel *et al.* 2012).

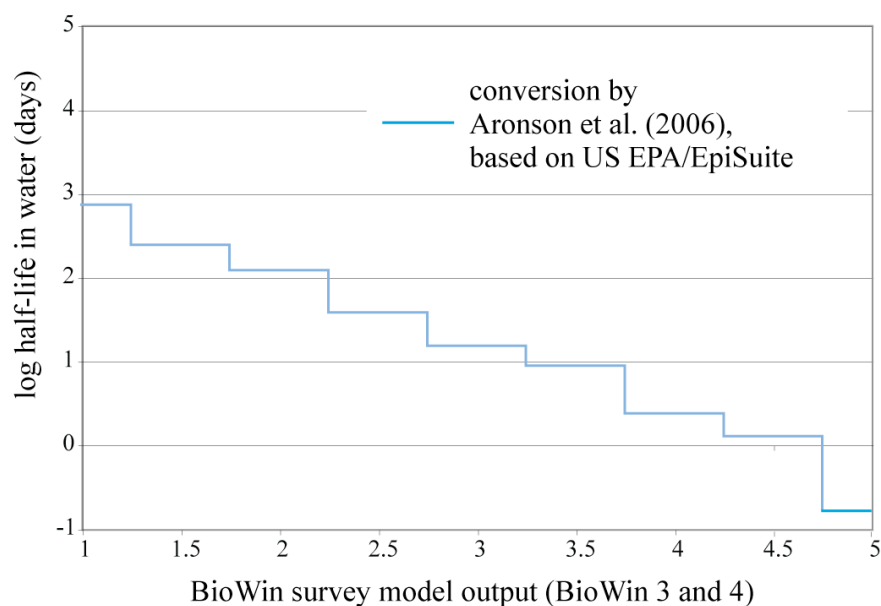


Fig 1. Konverze BIOWIN scores na poločasy života při aerobní biodegradaci ve vodě.

Tab 2. Konverze BIOWIN scores na poločasy života při aerobní biodegradaci ve vodě dle Aronson *et al.* (2006).

Descriptor	BIOWIN output (score)	half-life (days)
Hours	>4.75	0.17
Hours-days	4.25-4.75	1.25
Days	3.75-4.25	2.33
Days-weeks	3.25-3.75	8.67
Weeks	2.75-3.25	15
Weeks-months	2.25-2.75	37.5
Months	1.75-2.25	120
Recalcitrant	<1.75	180
-	1.25-1.75	240
-	<1.25	720

Úkol 2: Vezměte v úvahu chemickou strukturu sloučenin v Tab 2, jaké pozorujete trendy v poločasech života?

Úkol 3: Pro sloučeniny OCDD a octa-BDE, použijte detailní výstup BIOWIN a identifikujte strukturální fragmenty, které nejvíce ovlivňují výsledky BIOWIN 3&4.

Úkol 4: Porovnejte číselné příspěvky fragmentů, které jsou relevantní pro biodegradaci OCDD a octa-BDE s ostatními příspěvky fragmentů uvedených v Tab 3 (dle Boethling *et al.* (1994)), Hodnoty jsou v Tab. 1 ve sloupci “survey model – primary coeff” a “survey model – ultimate coeff” (v template list xls 7.3-4). Jsou příspěvky relevantních fragmentů pro OCDD a octa-BDE vysoké, nebo nízké?

Tab 3. Koeficienty BIOWIN survey model, dle Boethling *et al.* (1994).

	primary coeff	ultimate coeff
polycyclic aromatic hydrocarbon (≥ 4 rings)	-0.702	-0.799
unsubstituted aromatic (≤ 3 rings)	-0.343	-0.586
tertiary amine	-0.288	-0.255
trifluoromethyl (CF ₃)	-0.274	-0.513
aromatic Cl	-0.165	-0.207
aromatic Br	-0.154	-0.136
carbon with 4 single bonds and no H	-0.153	-0.212
aromatic I	-0.127	-0.045
aromatic NO ₂	-0.108	-0.17
aromatic NH ₂ or NH	-0.108	-0.135
aliphatic Cl	-0.101	-0.173
alkyl substituent on aromatic ring	-0.069	-0.075
cyanide/nitrile (C \equiv N)	-0.065	-0.082
triazine ring	-0.058	-0.246
azo group (N=N)	-0.053	-0.3
ketone (CC(=O)C)	-0.022	-0.023
pyridine ring	-0.019	-0.214
aliphatic ether	-0.0097	-0.0087
molecular weight	-0.00144	-0.00221
unsubstituted phenyl group (C ₆ H ₅)	0.0049	0.022
aromatic (C(=O)OH)	0.0078	0.088
N-nitroso (NN=O)	0.019	-0.385
aromatic sulfonic acid or salt	0.022	0.142
aliphatic Br	0.035	0.029
aromatic OH	0.04	0.056
aliphatic NH ₂ or NH	0.043	0.024
aromatic ether	0.077	-0.058
aliphatic OH	0.129	0.16
aromatic F	0.135	-0.407
aliphatic sulfonic acid or salt	0.177	0.193
carbamate	0.194	-0.047
aldehyde (CHO)	0.197	0.022
amide (C(=O)N or C(=S)N)	0.205	-0.054
ester (C(=O)OC)	0.229	0.14
linear C ₄ terminal alkyl (CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃)	0.269	0.298
aliphatic (C(=O)OH)	0.386	0.365
phosphate ester	0.465	0.154
equation constant	3.848	3.199

Literatura

Aronson, D., Boethling, R.S., Howard, P., Stiteler, W. (2006) Estimating biodegradation half-lives for use in chemical screening, *Chemosphere* **63**, 1953–1969.

Boethling, R.S., Howard, P.H., Meylan, W., Stiteler, W., Beauman, J., Tirado, N. (1994) Group contribution method for predicting probability and rate of aerobic biodegradation, *Environ. Sci. Technol.* **28**, 459–465.

Stempel, S., Scheringer, M., Ng, C.A., Hungerbühler, K. (2012) Screening for PBT chemicals among the “existing” and “new” chemicals of the EU, *Environmental Science & Technology* **46**, 5680–5687.