Ekotoxikologie vodních ekosystémů

Osud látek a biodostupnost

Faktory ovlivňující biodostupnost

- Forma toxikantu
- Dostupnost formy do organismu
  - Komplexaxe/dekomplexace
  - Adsopce/ desorpce
  - pH
  - Konc. Org. látek
  - Konc. Organic/ minerálních částic
  - Teplota okolí a v organismu
  - Způsob příjmu potravy (kůže, respirace, s potravou, membránový přenos)

Osud látek ve vodních ekosystémech ovlivní:

- Vlastnosti chemických látek
- Vlastnosti vodního prostředí
- Biotické i abiotické interakce
- Pohyb a míchání vody (…podzemní!!!)
- Kyslíkové a redox poměry na lokalitě
- pH
- Světlo (fotolýza, autotrofní biodegradace
- Sorpce (obsah org. Látek, jílo/min. komplexy, HK

Properties of a chemicals in environmental/hydro chemistry

- Molecular structure
- Molecular weight
- Water solubility and precipitation (a)
- Vapor pressure
- Henry's law constant
- Octanol-water partition coefficient (b)
- Sorption constants for soiLs, sediments, or atmospheric particle ©
- Acid or base dissociation constant (a)
- Complexation constants (a)
- Electron transfer (redox) constant (a,b)
- Polymerization constants (a)
- Diffusion coefficients
- Light absorption spectrum and quantums yield
- Bioconcentration factor (a,b)
- Biodegradation or biotransformalion constant (b)
- Hydrolysis constants (b)
- Particle size (for solids)

(a) Both equilibrium and rate constants are important.

(b) Primarily used for organic chemicals.

© Primarily used for inorganic chemicals.

Properties of the aquatic environment
important in predicting the fate and transport of a chemical

Physical properties

- Surface area
- Flow, extent of mixing, and bottom scouring
- Sedimentation rate
- Solar irradiation (at surface) and irradiance as function of wavelength and water body depth

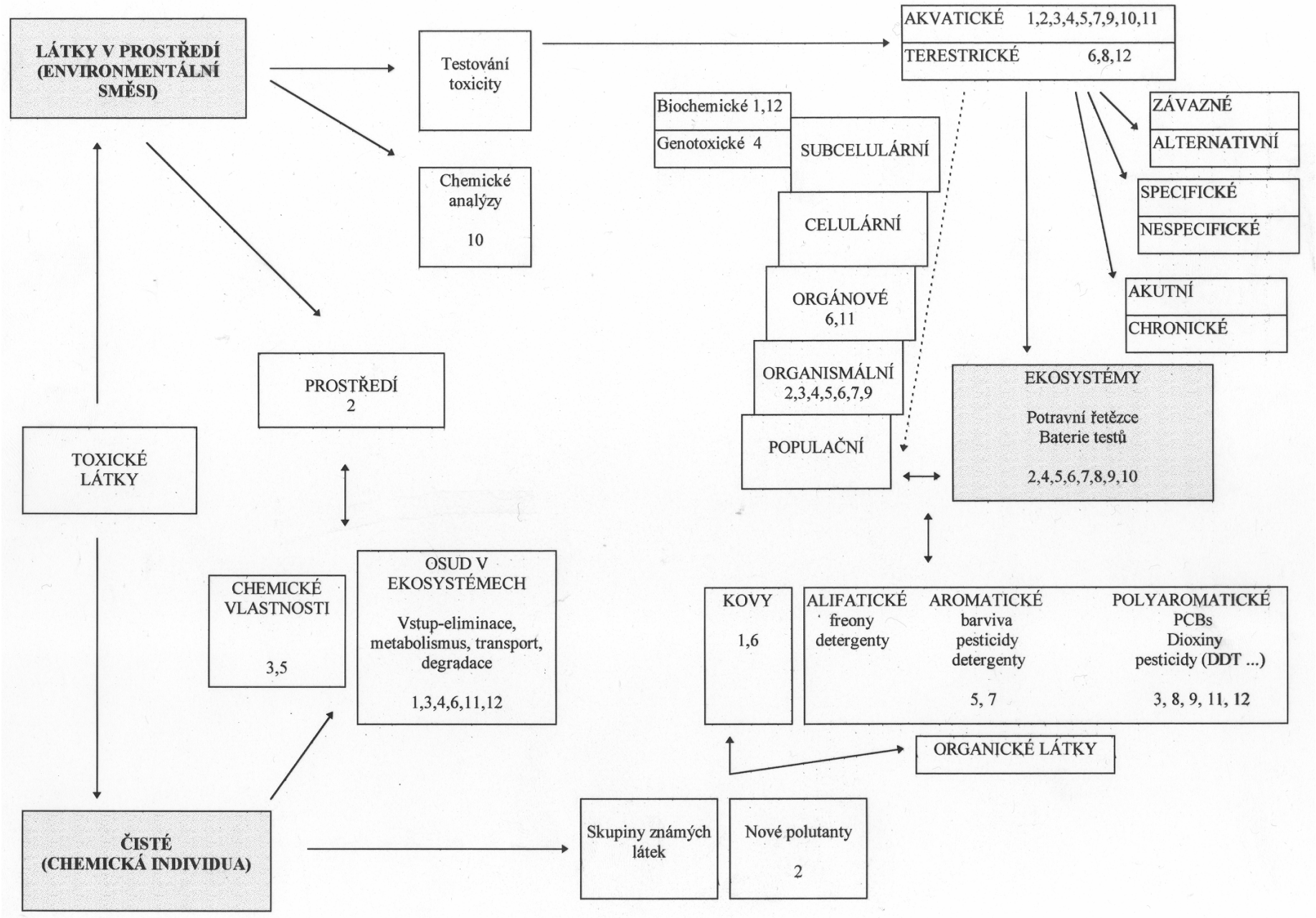
Chemical properties

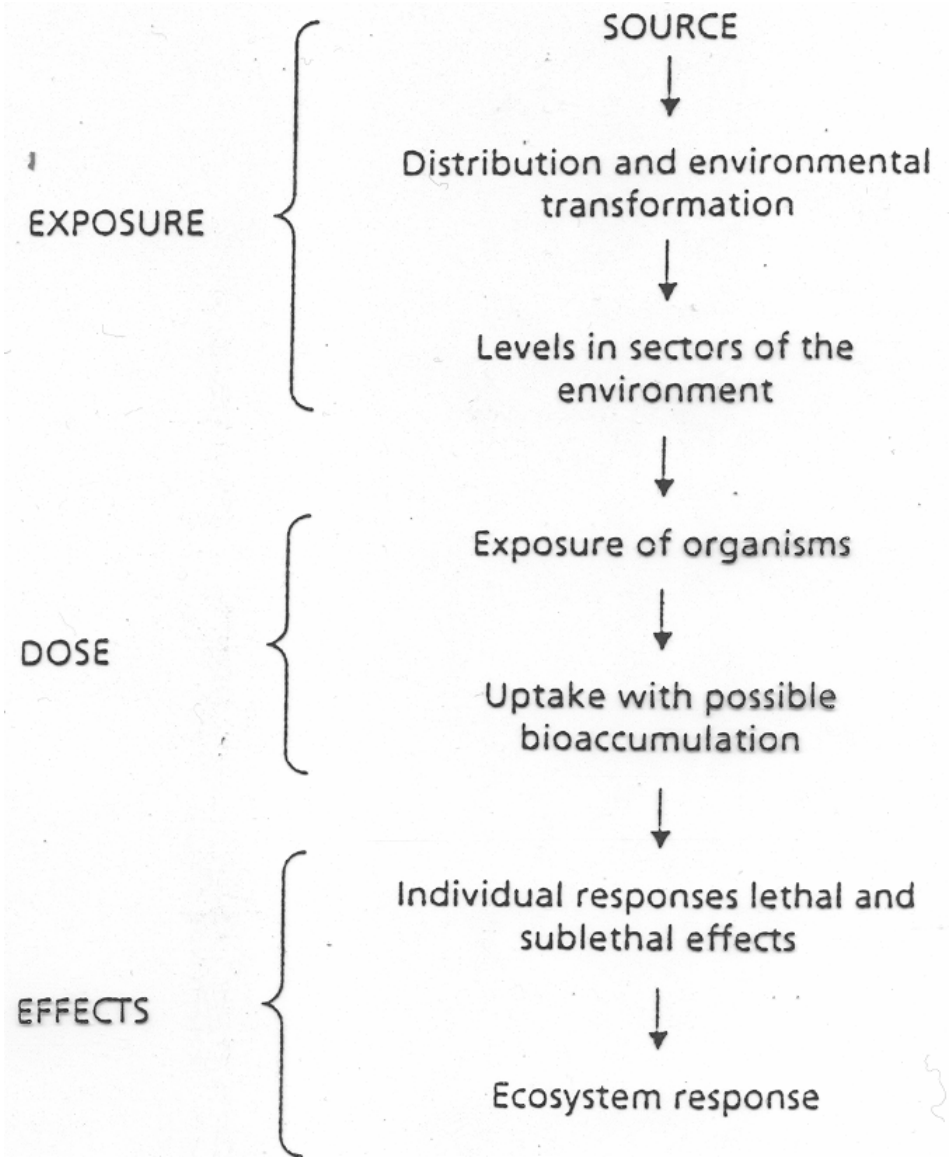
- Temperature
- pH
- Eh* (for several redox couples, including oxygen)
- Suspended solids (nature and concentration)
- Hardness, salinity, ionic strength
- Concentration of major ions
- Concentration of dissolved organic matter
- Bottom sediments (nature, including organic carbon content and redox status)

Biological properties

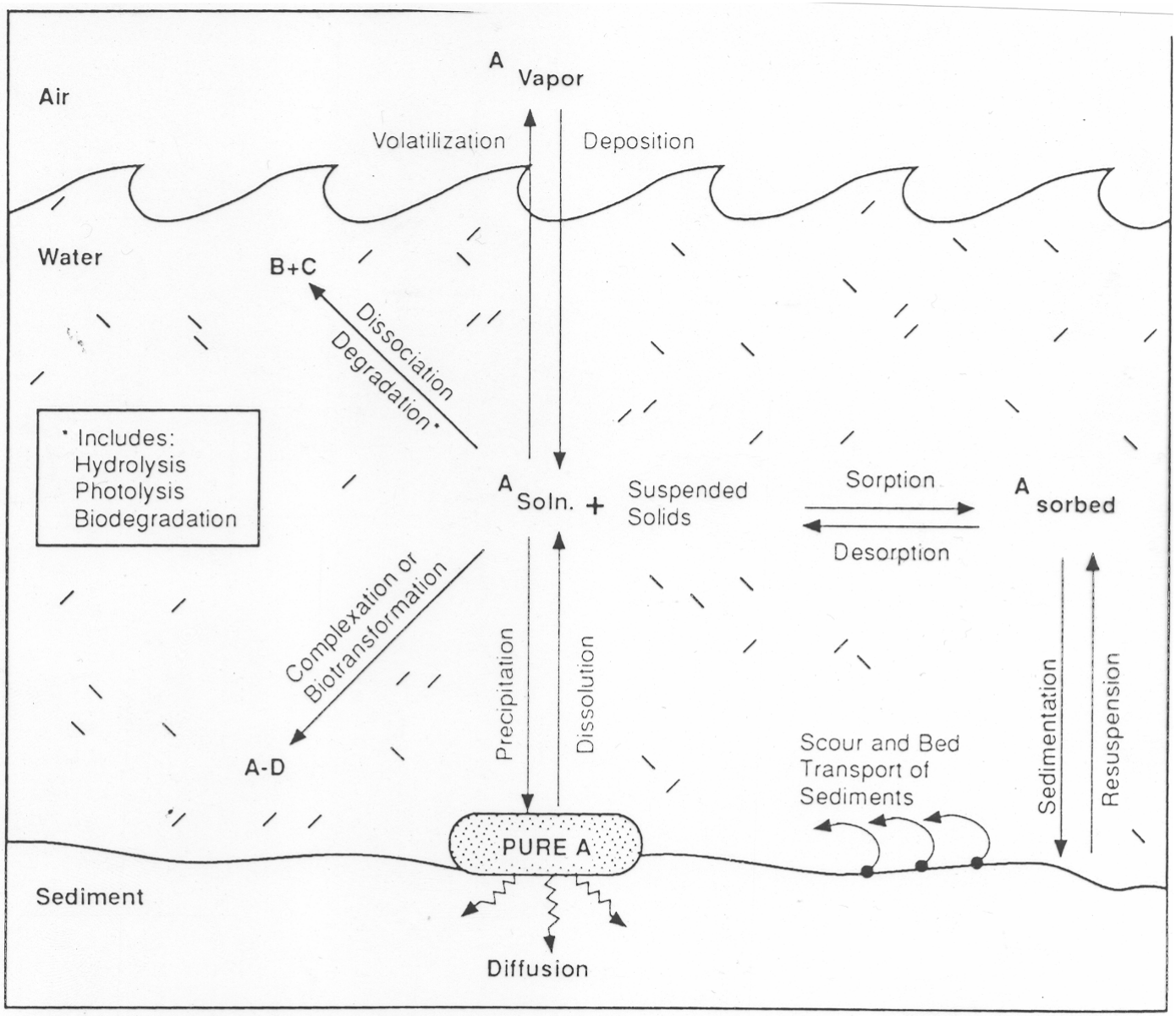
- Microbiological populations and activity
- Trophic status
- Nutrient concentrations

*Eh = value which «presents potential ot redox reactions.


LÁTKY V PROSTŘEDÍ (ENVIRONMENTÁLNÍ SMĚSI)
Testování toxicity
Chemické analýzy
10
AKVATICKÉ 1,2,3,4,5,7,9,10,11
TERESTRICKÉ 6,8,12
Biochemické 1,12
Genotoxické 4
SUBCELULÁRNÍ
CELULÁRNÍ
ORGÁNOVÉ
6,11
ORGANISMÁLNÍ
2,3,4,5,6,7,9
POPULAČNÍ
ZÁVAZNÉ
ALTERNATIVNÍ
SPECIFICKÉ
NESPECIFICKÉ
AKUTNÍ
CHRONICKÉ
EKOSYSTÉMY
Potravní řetězce
Baterie testů
2,4,5,6,7,8,9,10
PROSTŘEDÍ
2
TOXICKÉ LÁTKY
CHEMICKÉ VLASTNOSTI
3,5
OSUD V EKOSYSTÉMECH
Vstup-eliminace, metabolismus, transport, degradace
1,3,4,6,11,12
KOVY
1,6
ALIFATICKÉ
freony
detergenty
AROMATICKÉ
barviva
pesticidy
detergenty
5, 7
POLYAROMATICKÉ
PCBs
Dioxiny
pesticidy (DDT ...)
3, 8, 9, 11, 12
ORGANICKÉ LÁTKY
ČISTÉ (CHEMICKÁ INDIVIDUA)
Skupiny známých látek
Nové polutanty
2

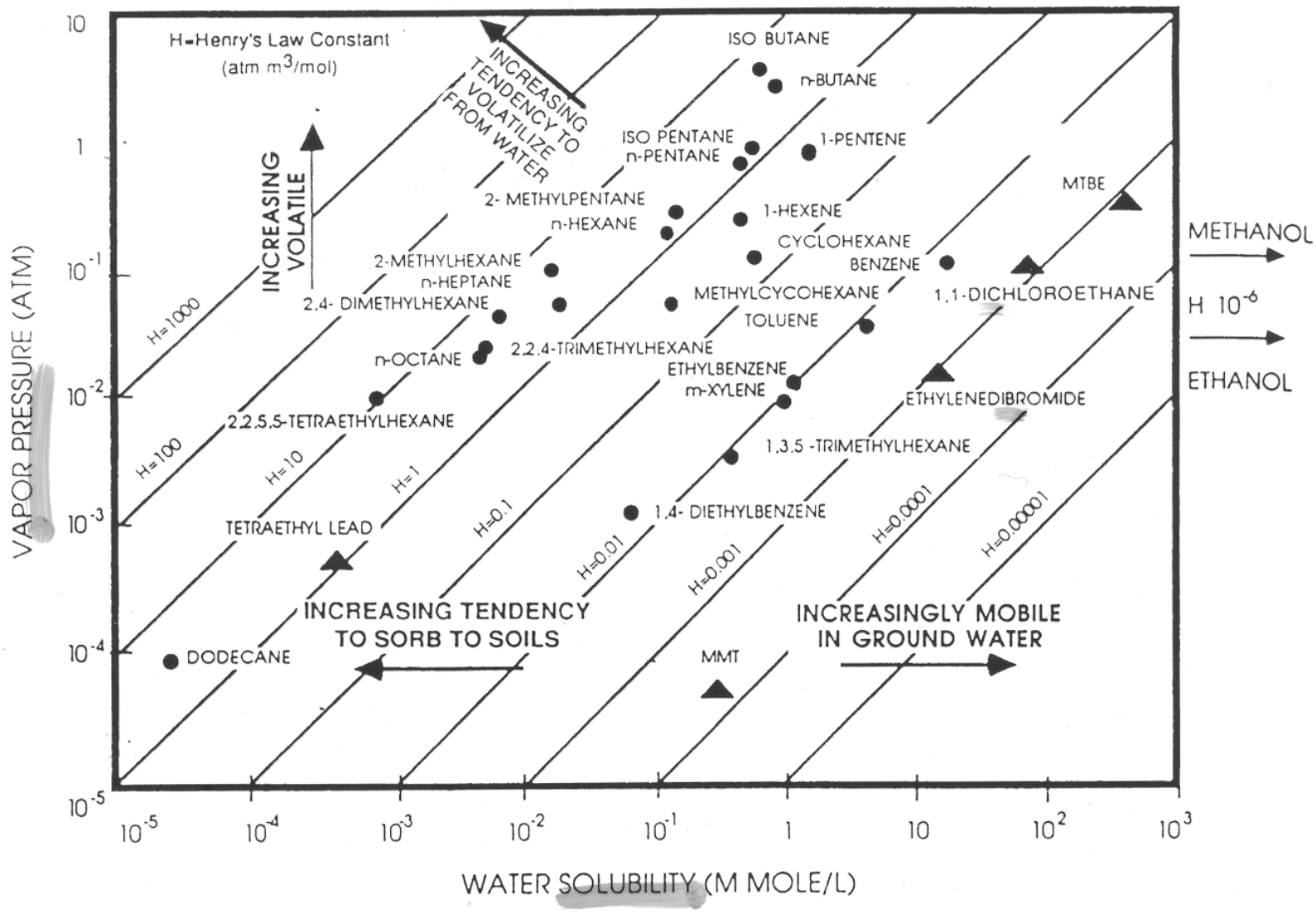


The effects of a chemical on an ecosystem can be illustrated as casscading from the source through individual organisms to ecosystems



Note: Symbols B and C represent degradation products of chemical A, and symbol D represents a ligand that complexes with (or adds to) A.

Figure 1. Schematic representation of some transport and transformation phenomena important for a chemical in an aquatic environment.



Rozdělovací koeficienty vybraných složek pohonných látek

Table 4. Particle types contributing to suspended materials in Onondaga Lake, New York

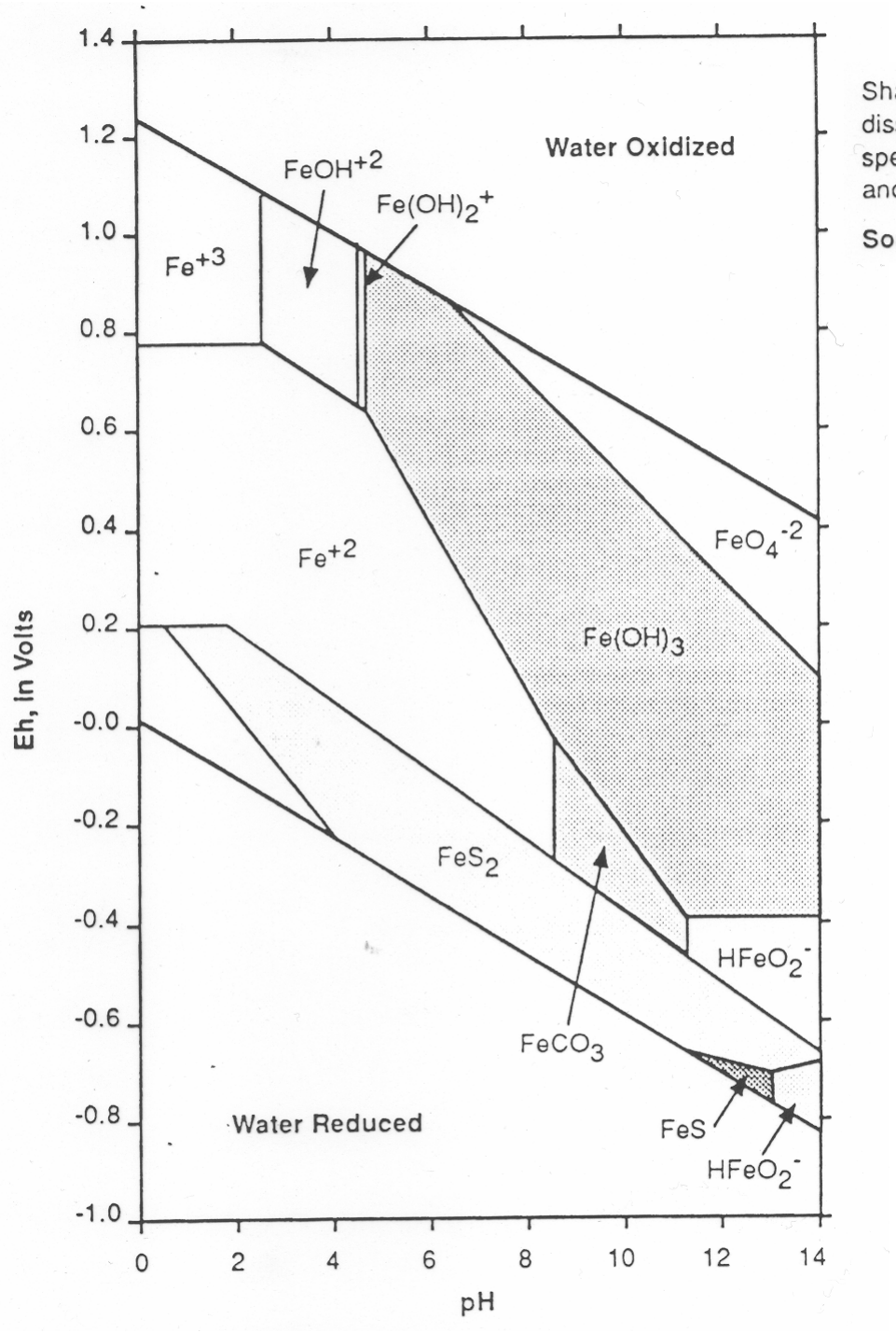
Particle type	% of total particle cross-sectional area[a]	
	Onandaga Lake	Tributaries
"Organic" detritus[b]	39 ± 22	9 ± 11
$CaCO_3$ precipitate	22 ± 13	20 ± 15
Quartz plus diatoms	23 ± 15	14 ± 5
"Clay particles"	3 ± 2	20 ± 12
Calcium precipitate on clay silica "nucleus"	8 ± 6	27 ± 14
Anything else	5 ± 6	10 ± 16

[a] Mean and standard deviation given for each entry.
[b] This category may also contain some low average atomic weight inorganic materials as well as true "organic" residues.
Source: Reprinted with permission from Johnson et al., 1991. Copyright 1991 American Chemical Society.

Table 5. Measured values of soil or sediment sorption constants for selected organic chemicals

Nonaromatic chemicals		Aromatic chemicals			
Chemical	log K_{oc}	Chemical	log K_{oc}	Chemical	log K_{oc}
Acrolein	0.70	Acetophenone	1.54	Glyphosate	3.42
Aldrin	4.30	Acridine	4.11	Hexachlorobenzene	3.59
Bromacil	1.86	Alachlor	2.28	Leptophos	3.97
Chlordane	5.15	Ametryn	2.59	Linuron	2.91
Crotoxyphos	2.23	2-Aminoanthracene	4.45	Methazole	3.42
Cycloate	2.54	6-Aminochrysene	5.16	Methoxychlor	4.90
2,4-D	1.23	Anthracene	4.78 (4.41)	2-Methoxy-3,5,6-trichloropyridine	2.96
DBCP	2.11	Aroclor 1254	6.25	9-Methylanthracene	4.81
Diallate	3.28	Asulam	2.48	3-Methylcholanthrene	6.09
cis-1,3-Dichloropropene	1.36	Atrazine	2.17	2-Methylnaphthalene	3.93
trans-1,3-Dichloropropene	1.41	Benzene	1.92	Methyl parathion	3.33
Dieldrin	3.82	Benzo[*a*]anthracene	6.24	Metobromuron	1.78
Dinoseb	2.09	Benzo[*a*]pyrene	6.74	Metribuzin	1.98
Disulfoton	3.25	2,2′-Biquinoline	4.02	Monolinuron	2.30
Endrin	3.56	Carbaryl	2.36	Monuron	2.00
EPTC	2.38	Carbofuran	1.45	Naphthalene	3.55 (3.11)
Ethion	4.19	Carbophenothion	4.66	1-Naphthol	2.72
Ethylene dibromide	1.64	Chlorbromuron	2.66	Napropamide	2.83
Heptachlor	4.00	Chloroneb	3.06	Neburon	3.36
Ipazine	3.22	Chloroxuron	3.51	Nitrapyrin	2.62
Lindane	2.96 (3.03)	Chlorpyrifos	4.13	Norfluorazon	3.28
Malathion	3.17	Chlorpyrifos-methyl	3.52	Oxadiazon	3.51
Methomyl	2.20	Chlorthiamid	2.03	2,2′,4,4′,5,5′-PCB	6.08
Methyl isothiocyanate	0.78	Chrysene	5.77	2,2′,4,5,5′-PCB	4.63
Monuron	2.20	Cyanazine	2.30	Parathion	3.93
Pebulate	2.80	DDD	5.38	Phenanthrene	4.36
Pentachlorophenol	2.95	DDE	5.17	Phenol	1.43
Phorate	3.51	DDT	5.48 (5.38)	Prometon	2.54
Picloram	1.17	13*H*-Dibenzo[*a*,*i*]carbazole	6.02	Prometryn	2.91
2,4,5-T	1.87	Dibenzothiophene	4.05	Pronamide	2.30
Tebuthiuron	2.79	Dibenzo[*a*,*h*]anthracene	6.23	Propachlor	2.42
Terbacil	1.71 (1.58)	Dicamba	0.27	Propazine	2.20
Toxaphene	3.00	Dichlobenil	2.27	Propham	1.71
Triallate	3.35	Diflubenzuron	3.83	Pyrazon	2.08
		7,12-Dimethylbenz[*a*]anthracene	5.35	Pyrene	4.92
		Dipropetryn	3.07	Pyroxychlor	3.48
		Diuron	2.60 (2.47)	Simazine	2.01
		Fenuron	1.43	Terbutryn	2.85
		Fluometuron	2.24	Tetracene	5.81
		Fluoranthene	5.31	3,5,6-Trichloro-2-pyridinol	2.11
		Fluorene	4.01	Trietazine	2.78
				Trifluralin	4.14

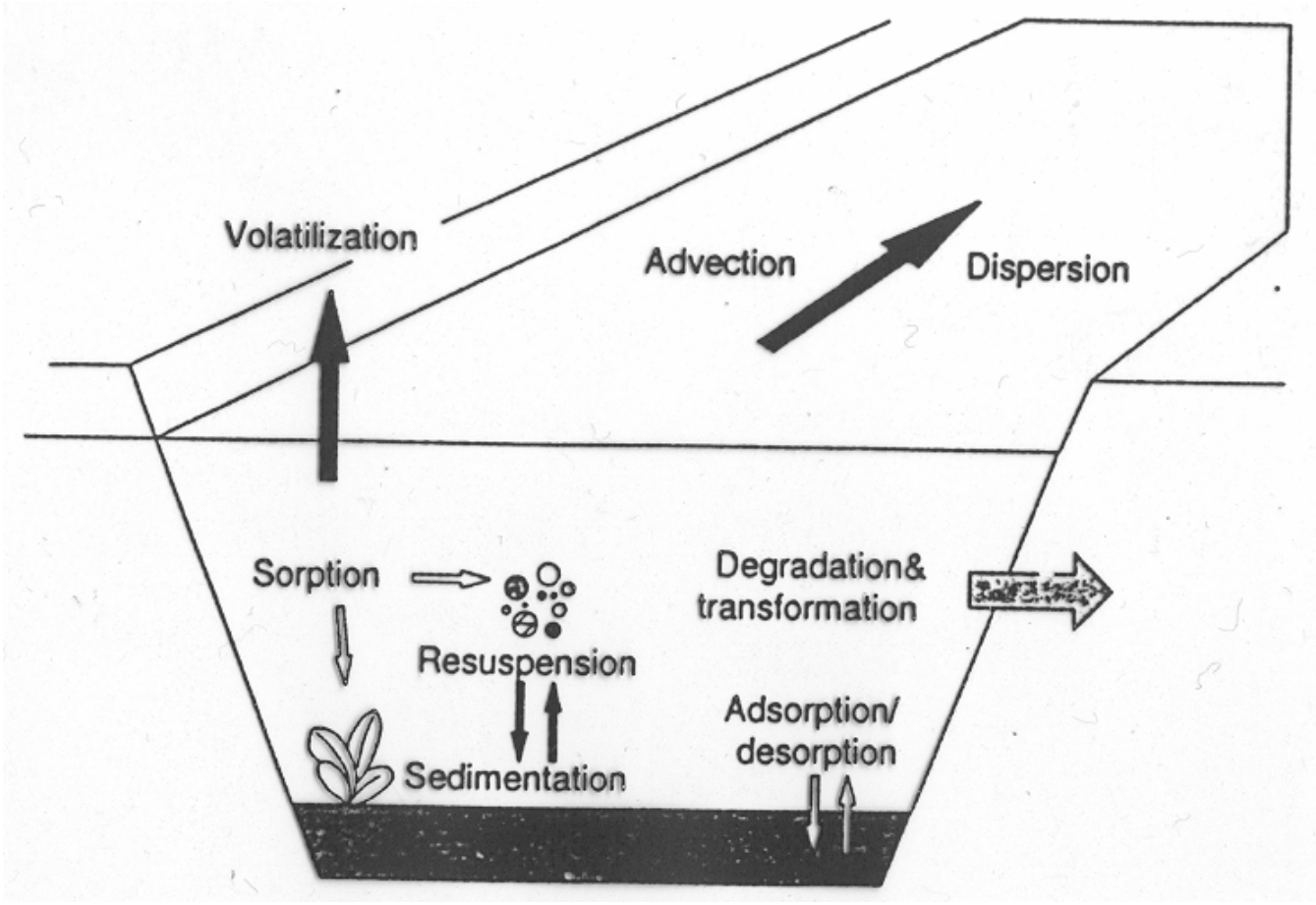
Source: Lyman and Loreti, 1987 (values compiled from several sources).



Shaded areas are stability regions for solids; predominant dissolved species are shown in unshaded areas. Activity of sulfur species = 96 mg/l as SO_4^{-2}. CO_2 species = 1,000 mg/l as HCO_3^{-}, and total dissolved iron activity = 0.0056 mg/l.

Source: Hem (1970)

Fields of stability for **solid and dissolved forms of iron** as a function of Eh and pH at 25°C and 1 atmosphere (Courtesy, 1990)



Schematic overview of the most important processes for the fate of pesticides in aquatic systems

BIOLOGICKÉ SYSTÉMY V EKOTOXIKOLOGII

VSTUP vs ELIMINACE

PŘÍJEM ~ ELIMINACE (*rovnováha, homeostáza)*

- udržování látky v organismu pod úrovní škodlivého efektu
- organismus však vynakládá energii na udržení rovnováhy *(procesy eliminace, metabolismus ...)*

PŘÍJEM > ELIMINACE

- nárůst koncentrací látky v organismu
- časem překročení úrovně efektu (*threshold level*)

Překročení limitů homeostatických procesů

-> přechod ze stadia rezistence
do stadia pozorovatelných negativních efektů u jedince
-> škodlivé efekty na vyšších úrovních organizace

BIOLOGICKÉ SYSTÉMY V EKOTOXIKOLOGII

Příklad efektů/odpovědí toxikantů na různých úrovních organismu

molekulární

- vazba na DNA, změna struktury, aktivace „inaktivních proteinů“

buněčná

- změna profilu proteinů produkovaných buňkou (*nové, mutace)*

orgánová

- změna fyziologie (*koncentrace hormonů, tlak krve*)

organismální

- změny chování/zdraví, změny reprodukce, růstu -> smrt

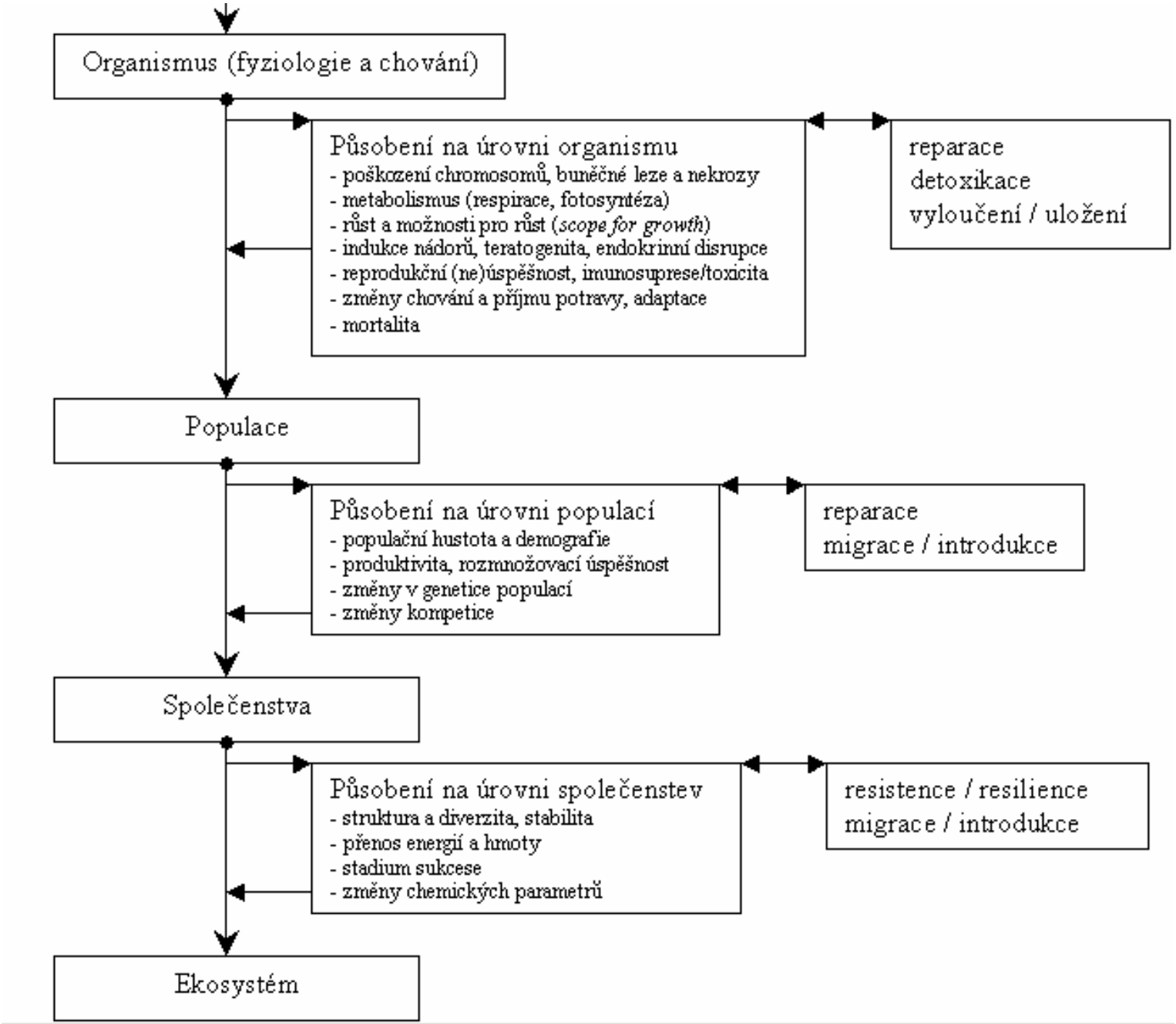
populace

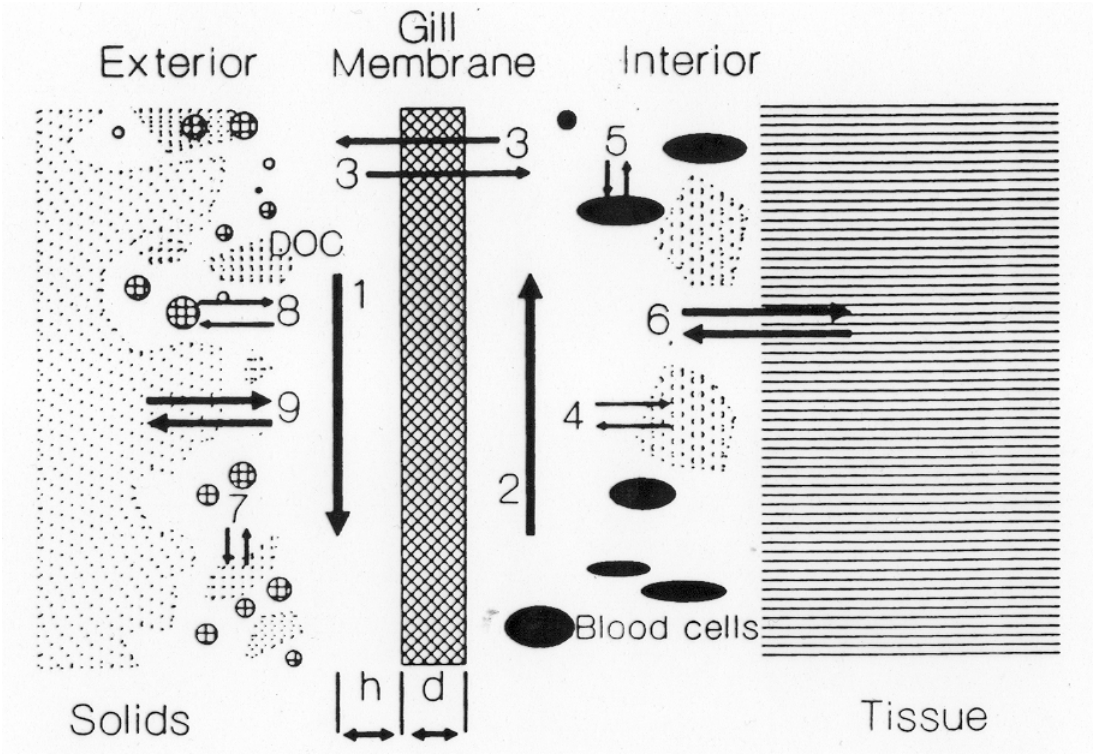
- změny demografie (staří > mladí)

společenstvo

- vymizení druhu

Na všech úrovních **reparace** (*reparace DNA, adaptace, nahrazení druhu)*


Organismus (fyziologie a chování)
Působení na úrovni organismu
- poškození chromosomů, buněčné leze a nekrozy
- metabolismus (respirace, fotosyntéza)
- růst a možnosti pro růst (*scope for growth*)
- indukce nádorů, teratogenita, endokrinní disrupce
- reprodukční (ne)úspěšnost, imunosuprese/toxicita
- změny chování a příjmu potravy, adaptace
- mortalita
reparace
detoxikace
vyloučení / uložení
Populace
Působení na úrovni populací
- populační hustota a demografie
- produktivita, rozmnožovací úspěšnost
- změny v genetice populací
- změny kompetice
reparace
migrace / introdukce
Společenstva
Působení na úrovni společenstev
- struktura a diverzita, stabilita
- přenos energií a hmoty
- stadium sukcese
- změny chemických parametrů
resistence / resilience
migrace / introdukce
Ekosystém



Conceptual view of major mass transfer processes affecting bioaccumulation in a multiphase system; in this case the gill is used as an illustrative example. Key: (1) flow of water along the membrane; (2) flow of blood in the organism; (3) flux of chemical **across the membrane**; (4) binding and release from blood serum proteins; (5) **absorption to/desorption from blood cells**; (6) transfer of chemical from **blood to tissues** via perfusion of major tissues; (7) **complexation /decomplexation** from dissolved organic carbon (DOC); (8) adsorption to/**desorption from particulate organic carbon** (POC); (9) adsorption to/ desorption from large particulale solids plus interval diffusion within Ihese particulates. d. diffusion distance across the membrane; h. thickness of the stagnant water layer adjacent to membrane.