



Centrum pro výzkum
toxických látek
v prostředí

Chemické látky v ekosystémech - Část 2: transformace -

Luděk Bláha, PŘF MU

Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.



INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Co by si student(ka) měl(a) odnést ?

- Vysvětlit hlavní transformační procesy, které látky prodělávají v prostředí
- Vysvětlit co je **persistence**, jak se měří a jak se vyjadřuje



CHEMICKÁ TRANSFORMACE A DEGRADACE

Typy transformací organických látek:

- částečná změna struktury (např. vstup OH do neutrální mk)
- degradace na menší organické molekuly
- úplná degradace org. látky (CO₂, H₂O)

Hlavní procesy

- chemická (fotochemie, hydrolýza) / biotická (enzymatická)

Výsledek transformace

- produkce netoxických produktů
- tvorba ještě toxičtějších produktů (! př. Hg -> Me-Hg)



CHEMICKÁ TRANSFORMACE A DEGRADACE

Hlavní procesy (záleží na prostředí)

- atmosféra: fotochemické transformace, oxidace (kyslík!)
- voda: reakce kyslíkem (v prostředí i v těle!), hydrolýza
(*hydroxyl, carbonyl ... -> vyšší polarita a rozpustnost*)
- anoxické prostředí (sedimenty, hluboké vrstvy v podzemí) - redukční reakce

Členění biotransformace (zjednodušeně)

Úplná biotransformace („Ready biodegradability“)

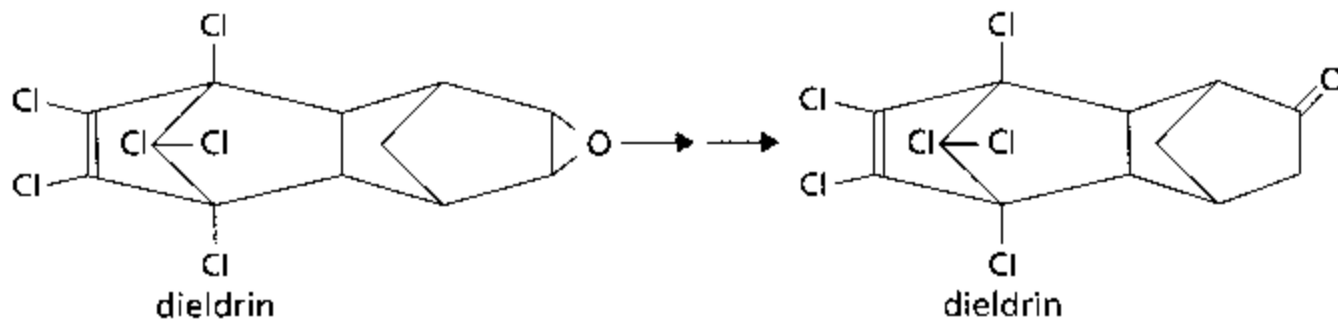
- látka je využívána mikroorganismy jako zdroj uhlíku → produkce CO₂

Kometabolizace

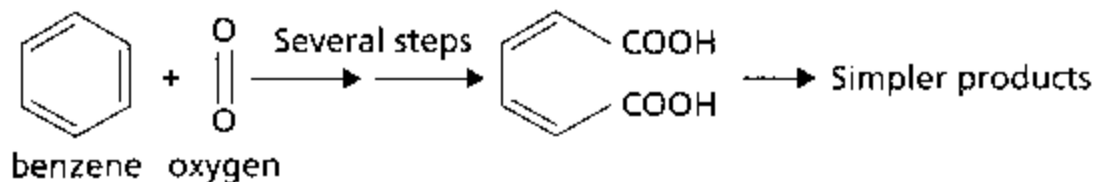
- mikroorganismy potřebují jiný (hlavní) zdroj C
- transformace látky v rámci „vedlejších“ procesů



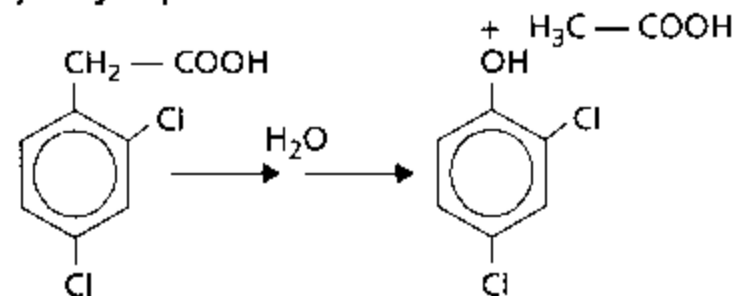
Transforming process



Transforming process



Hydrolysis process



2, 4-dichlorophenyl
acetic acid

Fig. 3.6 Some transformation and degradation patterns for chemicals discharged to the environment.



CHEMICKÁ TRANSFORMACE A DEGRADACE

Kinetika transformace - důležitá pro environmentální osud

Kinetika prvního řádu

$$C_t = C_0 \cdot e^{-kt}$$

C_t - koncentrace v čase t

C_0 - počáteční koncentrace

k - konstanta (rychlost degradace)

t - čas

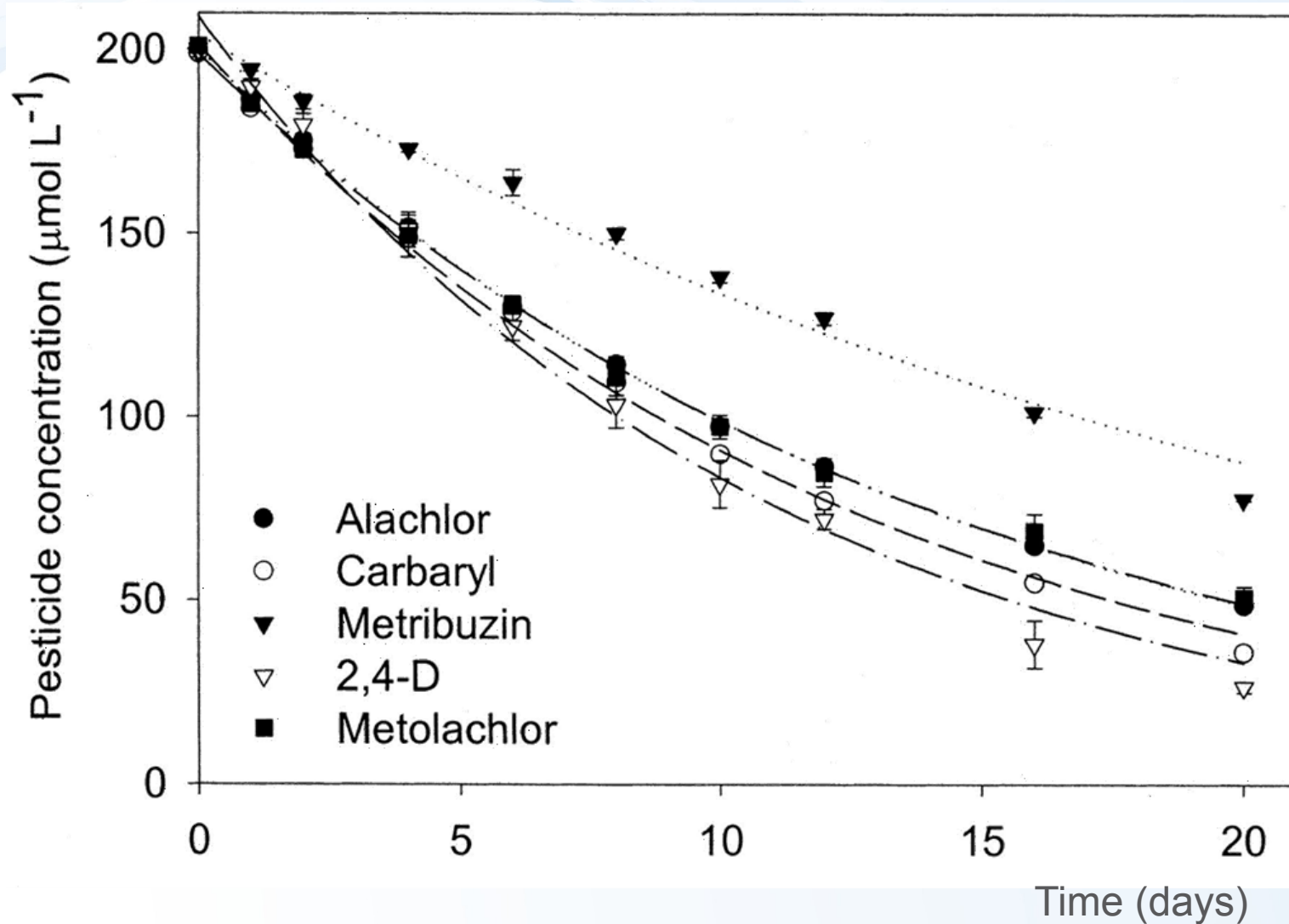
k - odvození ze závislosti $\ln(C_0/C_t)$ vs. t

Po odvození:

$$t_{1/2} = \ln 2 / k = 0.693 / k \quad (= \text{poločas života } \textit{half-life})$$



CHEMICKÁ TRANSFORMACE A DEGRADACE



Poločas života vybraných pesticidů v půdě

Příklady

Látka	Poločas života v půdě (roky) ($t_{1/2}$, <i>resp. DT50 – disappearance time 50%</i>)
Chlorované látky	
DDT	3-10
Dieldrin	1-7
Toxafen	10
Organofosfát – chlorfenos	0,2
Karbamát – carbofuran	0,05 – 1



Stanovení degradace v praxi (standards)

Doporučení OECD – guideline 307

- Aerobic and Anaerobic Transformation in Soil
 - Přidání studované látky (může být radioaktivně značená)
 - Inkubace v čase
 - extrakce půdy (volatilní frakce)
 - stanovení úbytku původní látky
vznik produktů transformace
 - Chemické metody (GC, LC apod)

Domácí úkol (1)

Znát OECD 307 guideline

(zejména části: Principles + část 55 = Test report)

Domácí úkol (2)

Experimentální test anaerobní degradace:

http://www.youtube.com/watch?v=Y_zFPkbrwSY



Kde najít informace o vlastnostech látek ?

- **CAS – Chemical Abstract Services**
 - Provozuje Americká Chemická Společnost (ACS)
 - CAS Number - Unikátní identifikátor
- **eChemPortal.org**



Print

English ▾

The Global Portal to Information on Chemical Substances



eChemPortal ▾

- > Home
- > Substance Search
- > Property Search
- > What's new?
- > General Information
- > Participating Databases
- > Roles & Responsibilities
- > Extension of the Portal
- > Linking to eChemPortal
- > Schedules of Assessments
- > Other useful information
- > FAQ
- > Help

Substance Search

Substance Search > Search Result Step 1 > Search Result Step 2

Search history

- You searched for
Name: limonen*
Participants: ACToR, AGRITOX, CCR, CESAR, Combined Exposures, ECHA CHEM, EnviChem, ESIS, GHS-J, HPVIS, HSDB, HSNO CCID, INCHEM, J-CHECK, JECDB, NICNAS Other, NICNAS PEC, OECD HPV, OECD SIDS IUCLID, SIDS UNEP, SPIN, UK CCRMP Outputs, US EPA IRIS, US EPA SRS
- You selected
Name: Limonene

Domácí úkol (3)

- Pro jednu z chemických „látek“, které jste našli v koupelně vyhledejte tyto údaje:
 - CAS Number
 - Biodegradabilita



SHRNUTÍ – otázky

Který prvek hraje nejvýznamnější roli v transformacích chemických látek v prostředí země?

Které hlavní transformační procesy prodělávají látky v různých matricích v prostředí (vzduch, půda, voda, sedimenty)

Co je to poločas života látky? Uveďte příklad látky s krátkým a dlouhým poločasem života? Jak dlouhé jsou u takových látek jejich poločasy života?

Jak se v praxi stanovuje biodegradovatelnost chemické látky?

Jak se bude lišit poločas života benz[a]pyrenu (BaP) v těchto rozdílných situacích? BaP je vázán na částice aerosolu ve vzduchu, BaP vázán v sedimentu na dně vodní nádrže.

V půdě je triazin v koncentraci 120 mg/kg a jeho DT50 je 180 dní. Za jak dlouho lze očekávat snížení koncentrace pod 10 mg/kg?