

# CHEMIE ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ I

## Environmentální procesy

(04)

## Chemické látky v prostředí – základní definice a pojmy

Ivan Holoubek

**RECETOX, Masaryk University, Brno, CR**

**[holoubek@recetox.muni.cz](mailto:holoubek@recetox.muni.cz); <http://recetox.muni.cz>**

# (04) Chemické látky v prostředí – základní definice a pojmy

Chemické látky v prostředí – základní pojmy a definice.

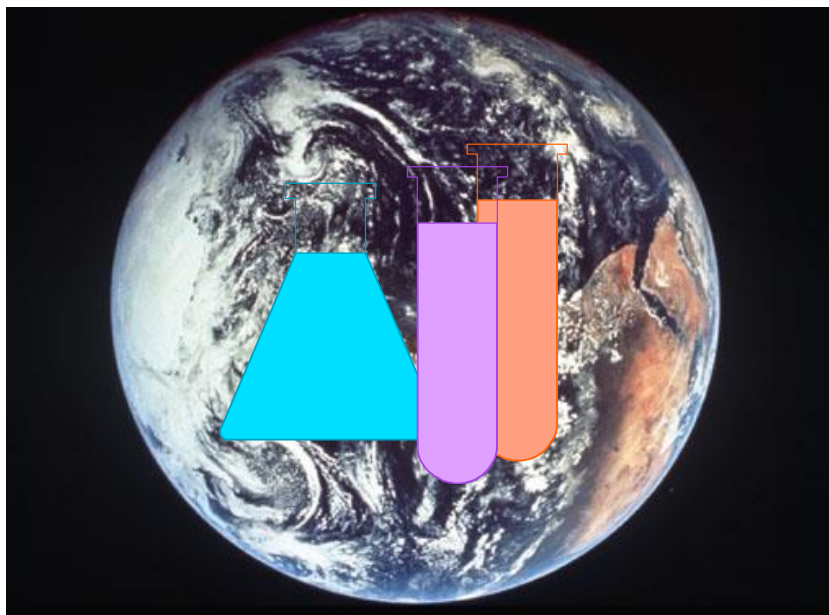
Environmentálně nebezpečné chemické látky.

Osud chemických látek v prostředí.

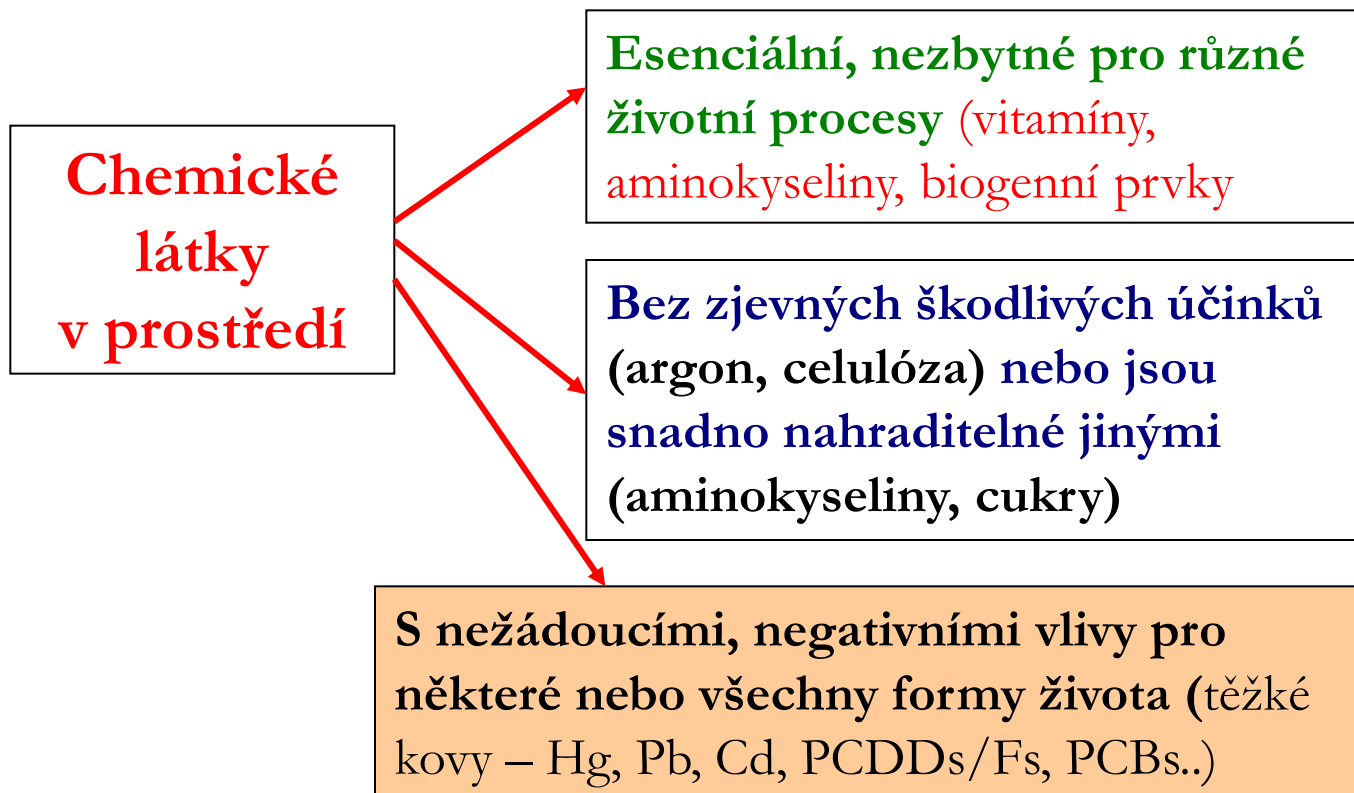
# Environmentální chemie - současné přístupy a trendy

aneb

## Chemie vně reakční nádoby



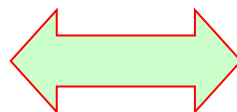
# Chemické látky - > 120 000 000



# Hodnocení výskytu chemických látek v prostředí

## Chemické látky v prostředí

Chemická struktura



Biologická aktivita

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



# Co je škodlivé ?

## Co je škodlivé ?

- ↪ Smrt
- ↪ Vážné poškození
- ↪ Vážné onemocnění
- ↪ Genetické mutace
- ↪ Vrozené vady
- ↪ Snížení obranyschopnosti
- ↪ Neurotoxická

# Znečištění

## Kontaminace:

↪ Nevykazuje 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

# Cause - effect paradigm: nothing new....



Paracelsus (1493 - 1541)

What is there which is not a poison?

↪ All things are poison and nothing without poison.

↪ Solely the dose determines that a thing is not a poison.'



# Definice, základní pojmy

## Toxicita

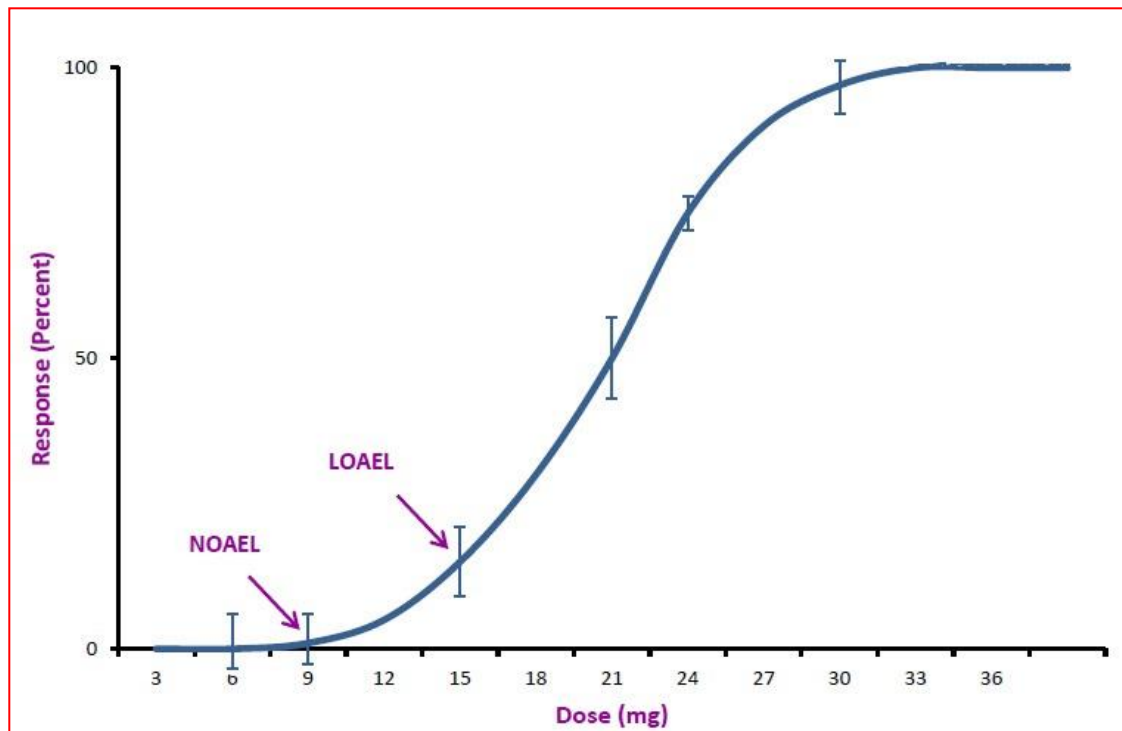
**Toxicita (toxicity)** – schopnost látky poškozovat živý organismus, je dána jejími fyzikálně-chemickými vlastnostmi

## Expozice

**Expozice (exposure)** – proces, při kterém organismus přichází do styku s látkou a při kterém lze předpokládat přestoupení hranice organismu.

Expoziční cesty (inhalační, perorální, dermální..)

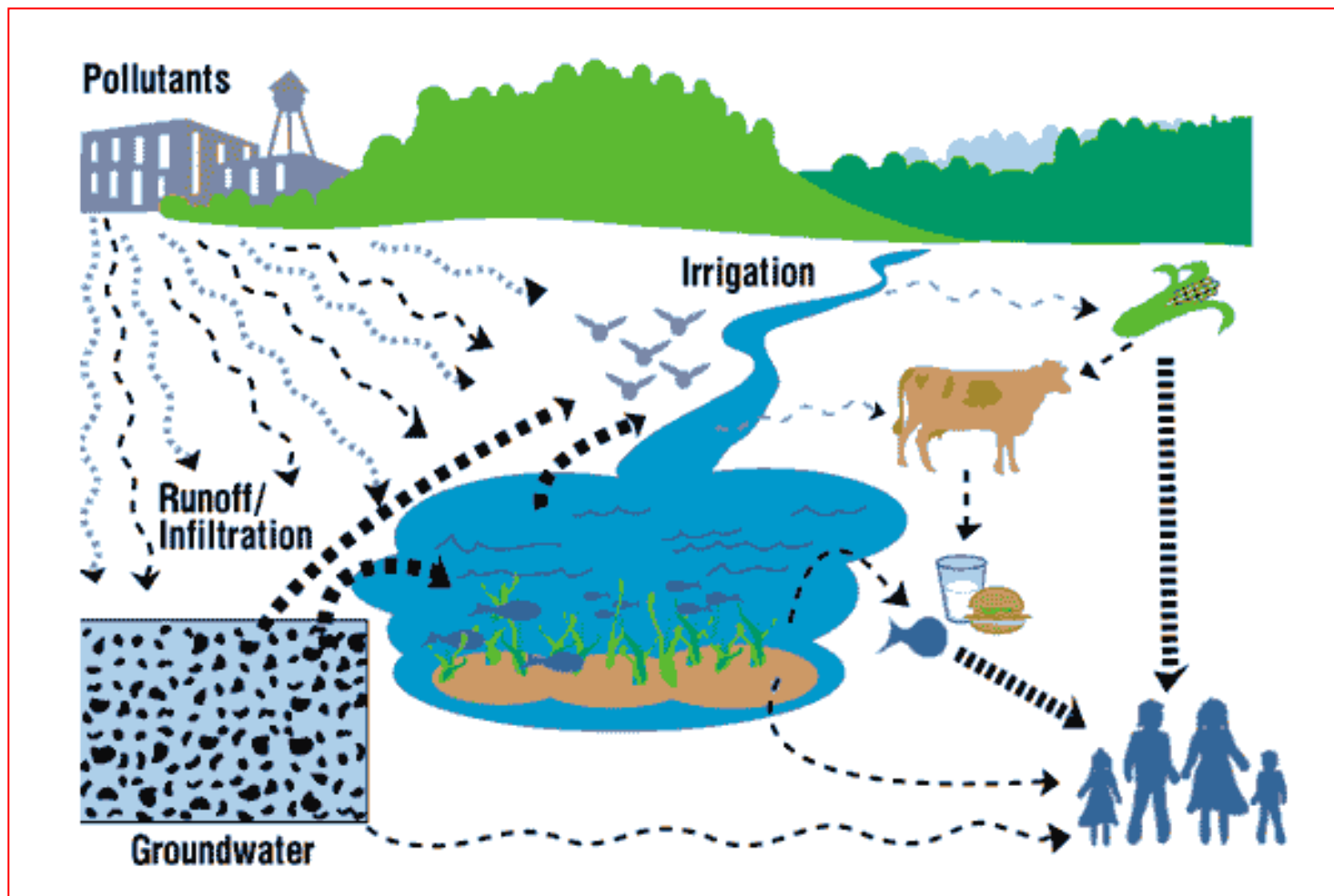
# Křivka dávka - odpověď



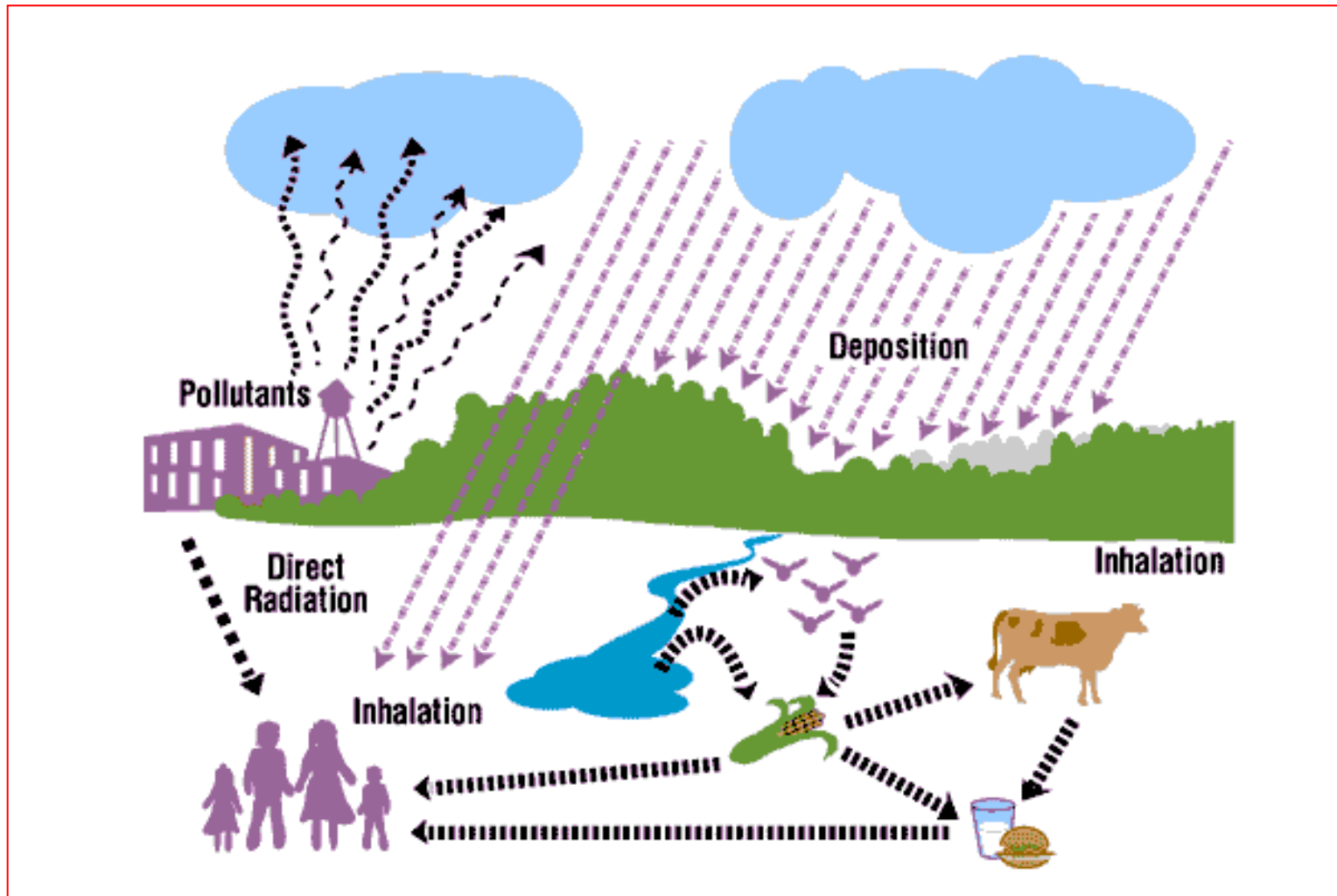
**NOAEL:** It is the highest data point at which no observed adverse effect was found.

**LOAEL:** It is the lowest data point at which observed adverse effect was found

# Expozice



# Expozice

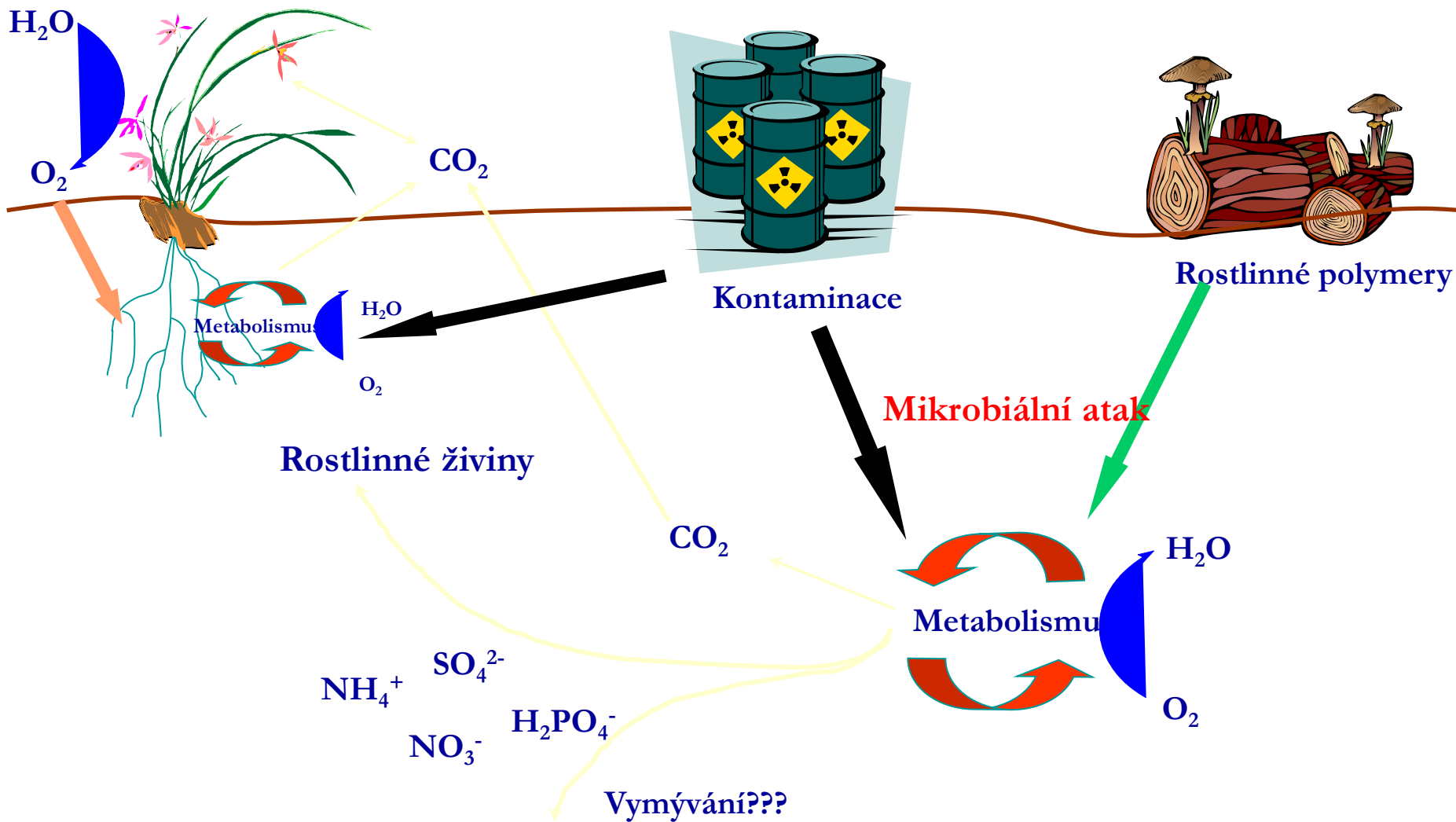




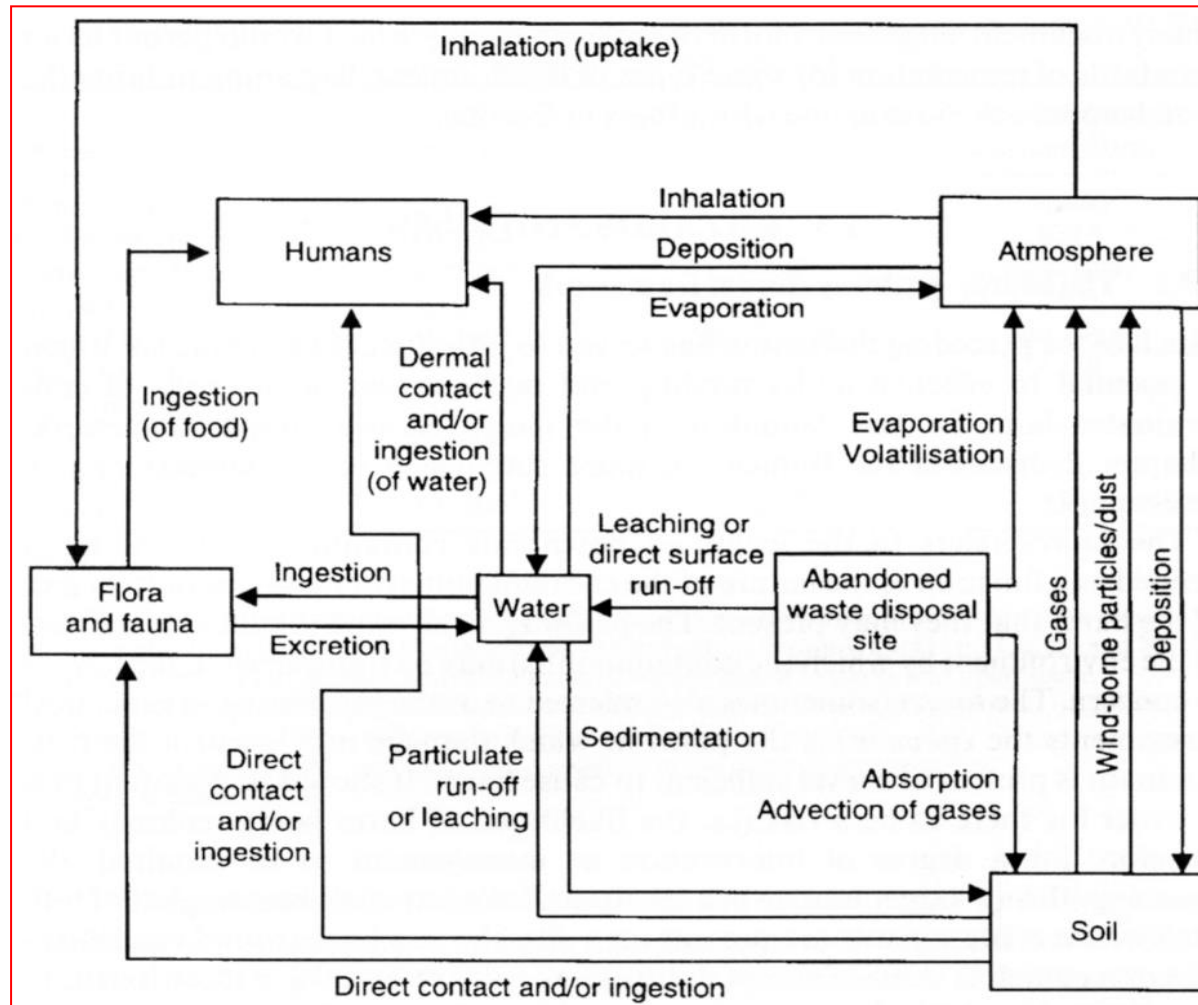


Energie

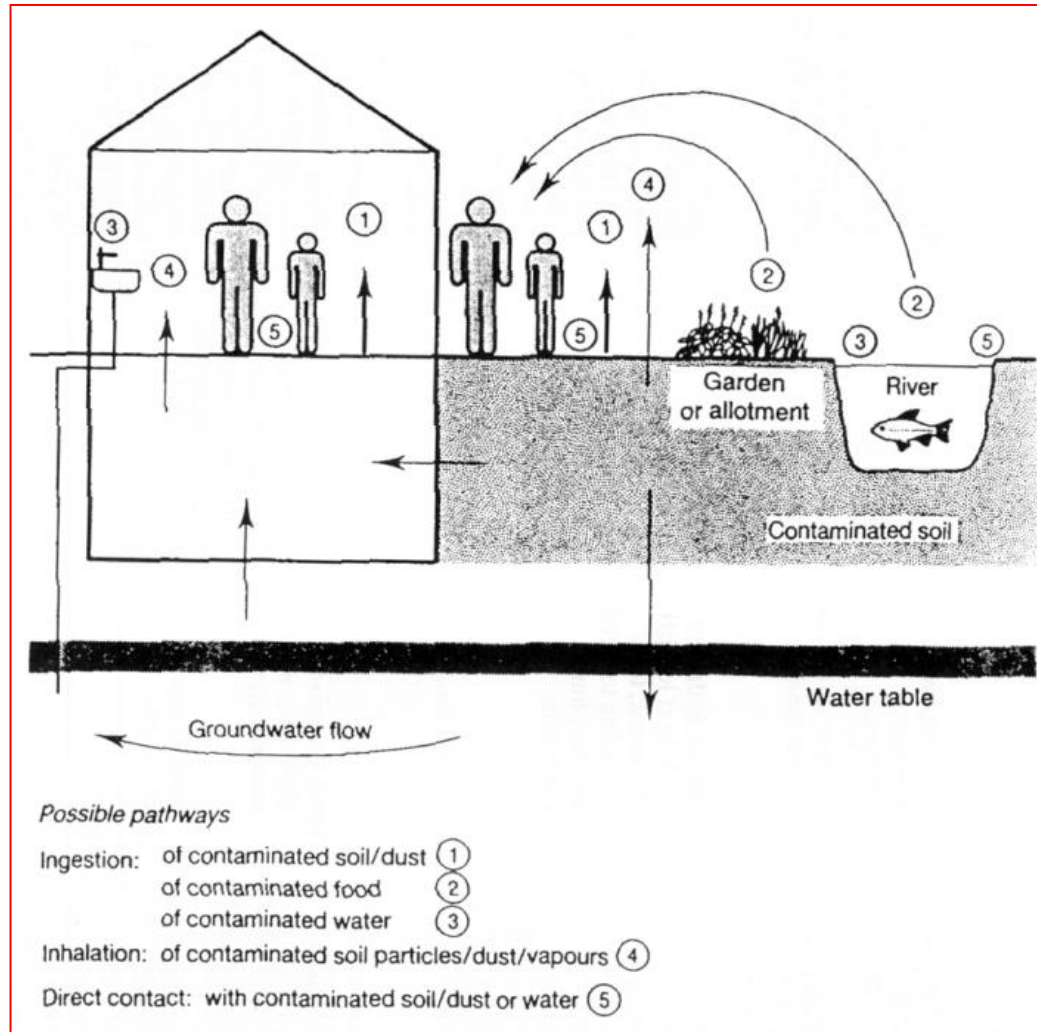
# Cyklus kontaminantů



# Cesty kontaminace a expozice



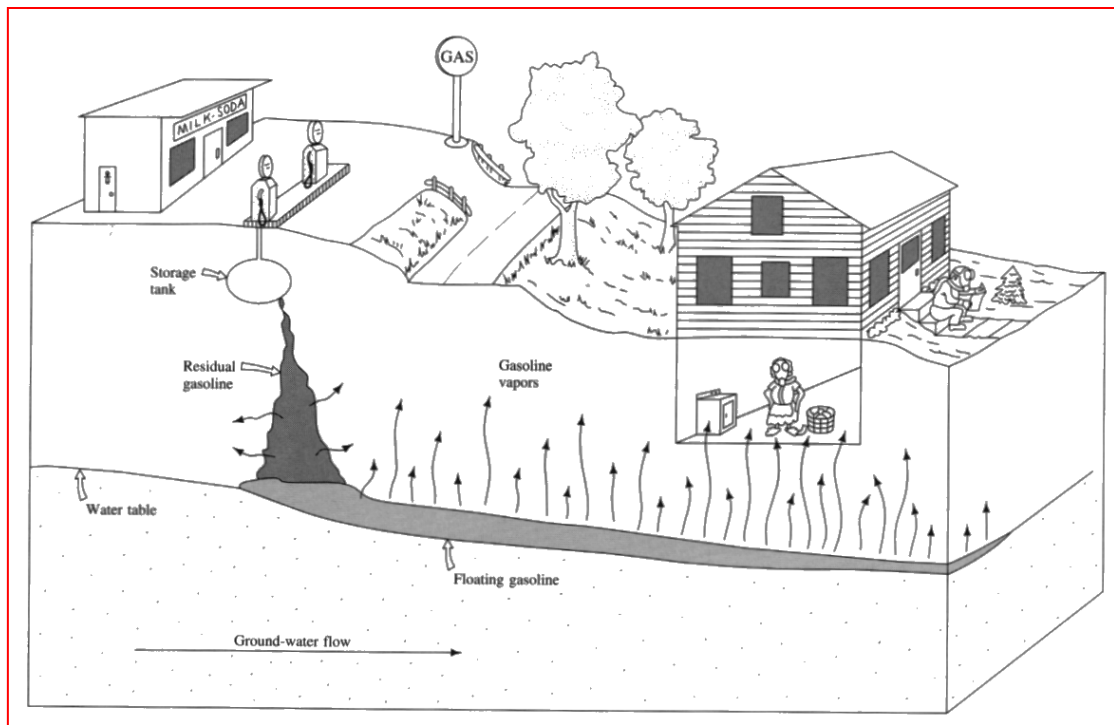
# Expozice lidské populace



# Fyzikální, chemické a biologické mechanismy řídicí 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]

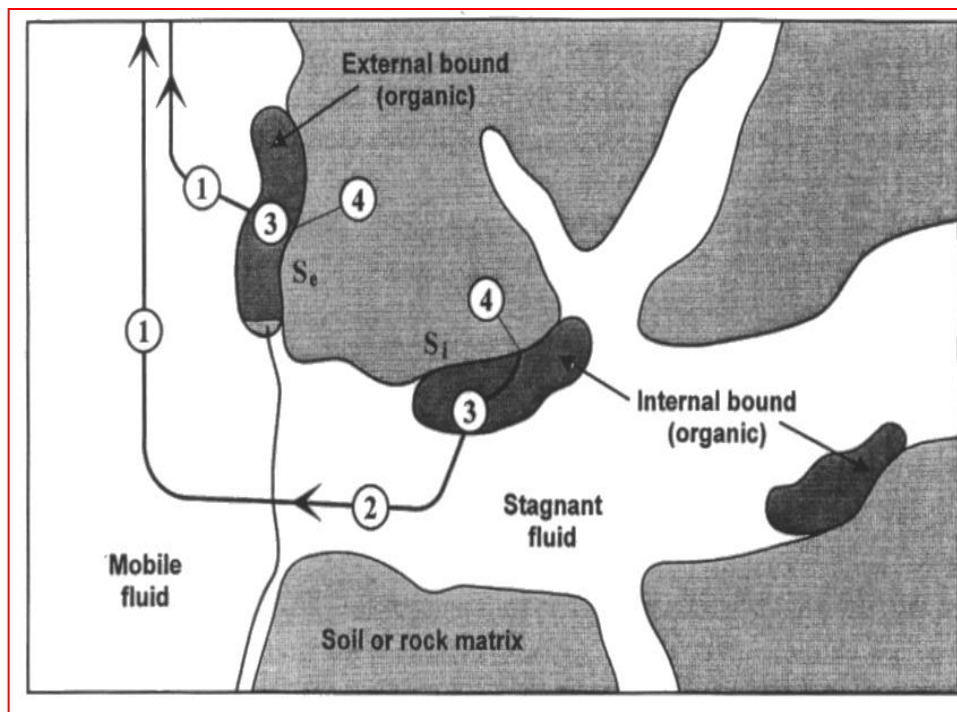
# Chování chemických látek

Společným jevem je **adsorpce** rozpuštěných látek na povrchu tuhé fáze.

Typické pro hydrofóbní organické látky.

Podobně některé kationy kovů mají afinitu k jílovým minerálům a může docházet k **iontové výměně**.

Rozpuštěné látky také **difundují** z/do zón s nízkou rychlostí toku.



[E.K.Nyer et al., 1996]

# Definice, základní pojmy

## Dávka

**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

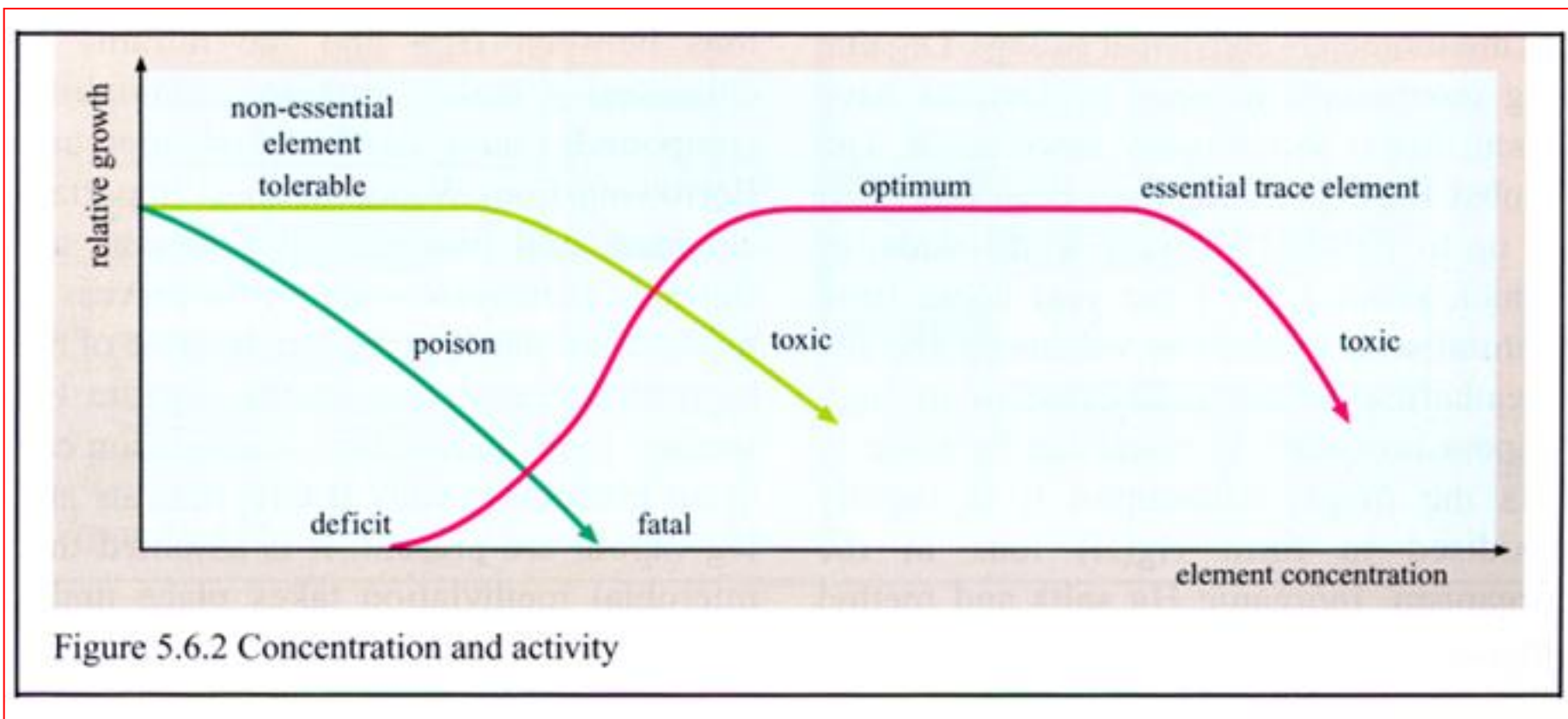
Výsledek interakce chemické látky s živým organismem

**Účinek (effect)** – kvalitativní pojem (hepatotoxický, genotoxický...)

**Odpověď (response)** – měřitelná míra téhož (změna aktivity některého jaterního enzymu..)

**Vztah dávka – účinek (dose - response curve)**

# Koncentrace a účinky



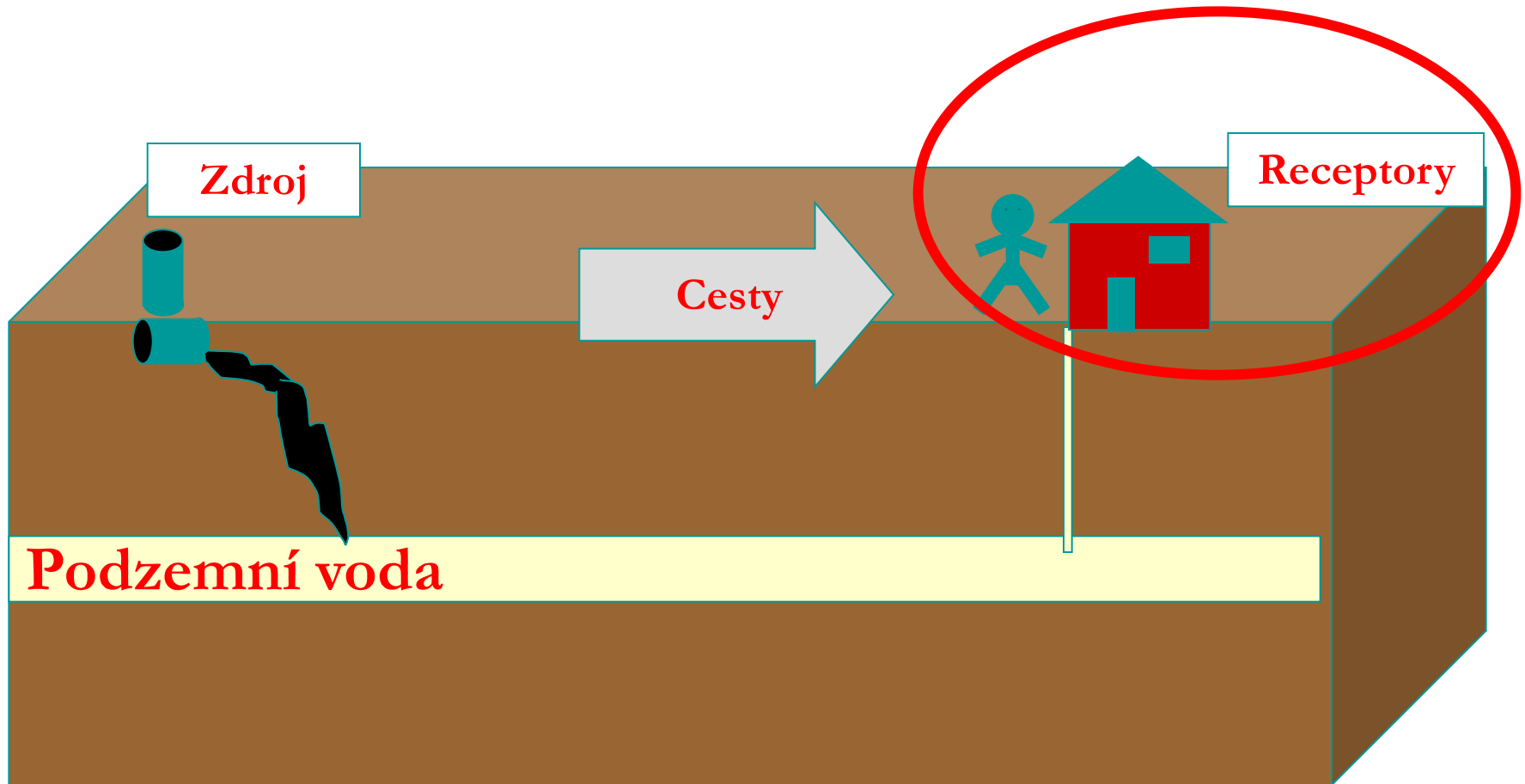
# Definice, základní pojmy

## Druhy účinků

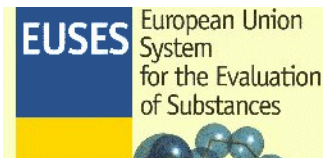
- ↪ **akutní** – expozice vysokou koncentrací toxické látky,
- ↪ **chronický** – opakovaná, dlouhodobá expozice relativně nízkými koncentracemi
- ↪ **genotoxický** – ovlivnění genetické informace (mutagenní, teratogenní, karcinogenní)



# Koncept rizika pro lidskou populaci



# Hodnocení rizik



Expozice

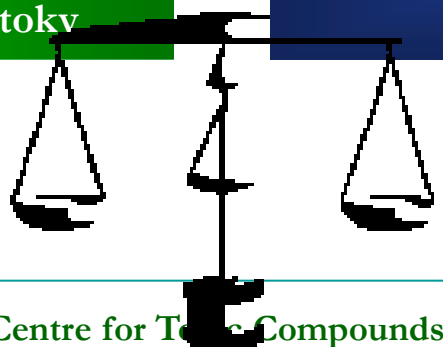
Účinky



Laboratorní (a terénní) studie  
Testy ekotoxicity

Předpovídaná expoziční  
koncentrace (PEC)

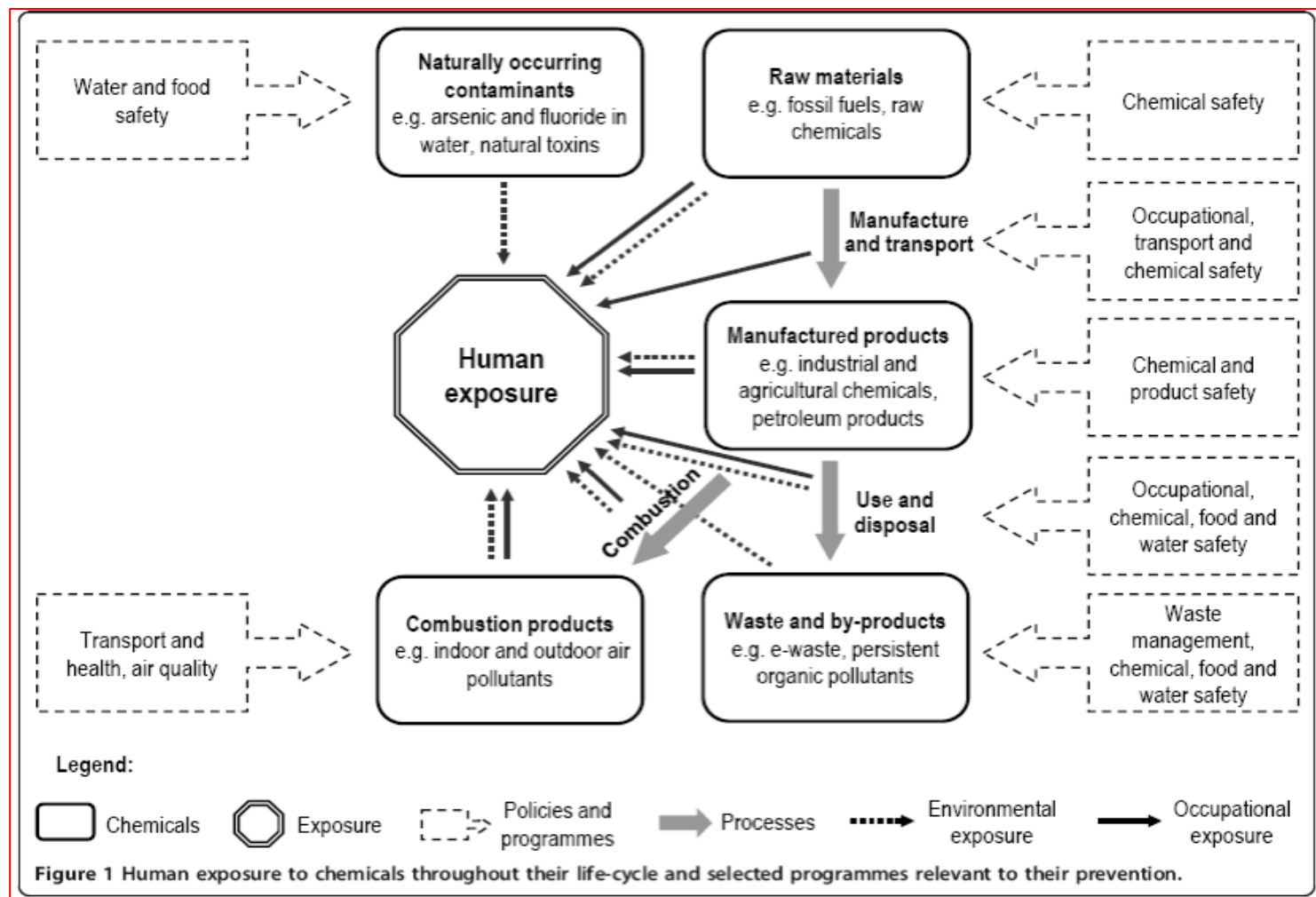
Předpovídaná koncentrace  
bez účinku (PNEC)



Research Centre for Toxic Compounds in the Environment

<http://recetox.muni.cz>

# Chemické látky - > 120 000 000



# Definice, základní pojmy

## 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.

# Definice, základní pojmy

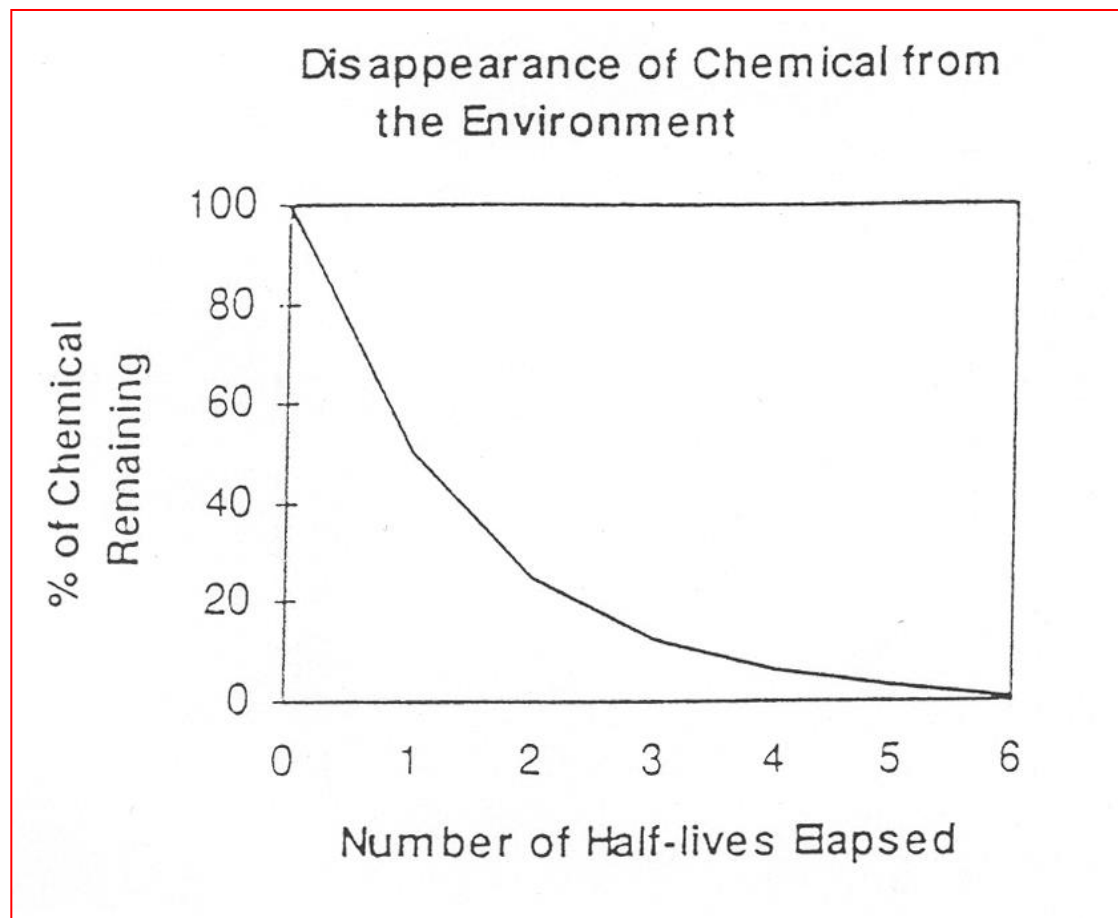
## Persistence

**Persistence za daných environmentálních podmínek závisí na:**

- ↪ vlastnosti dané sloučeniny
  
- ↪ vlastnosti dané složky prostředí
  - intenzita slunečního světla
  - koncentrace hydroxylových radikálů
  - složení mikrobiálních společenstev
  - teplota...

# Definice, základní pojmy

## Persistence



# Definice, základní pojmy

## Biodostupnost

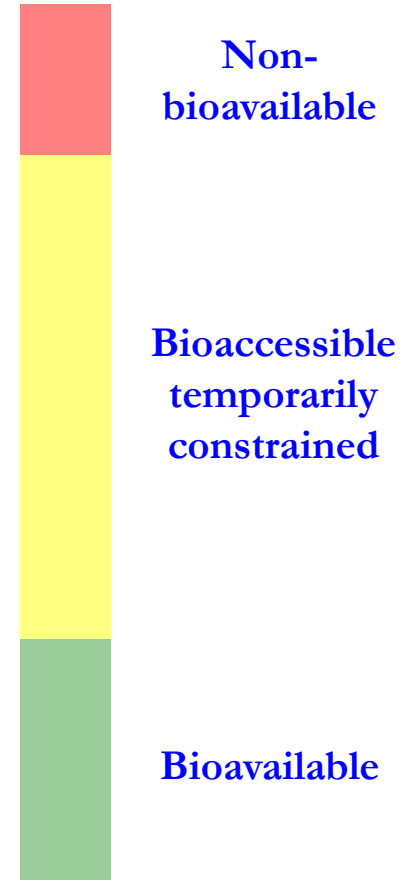
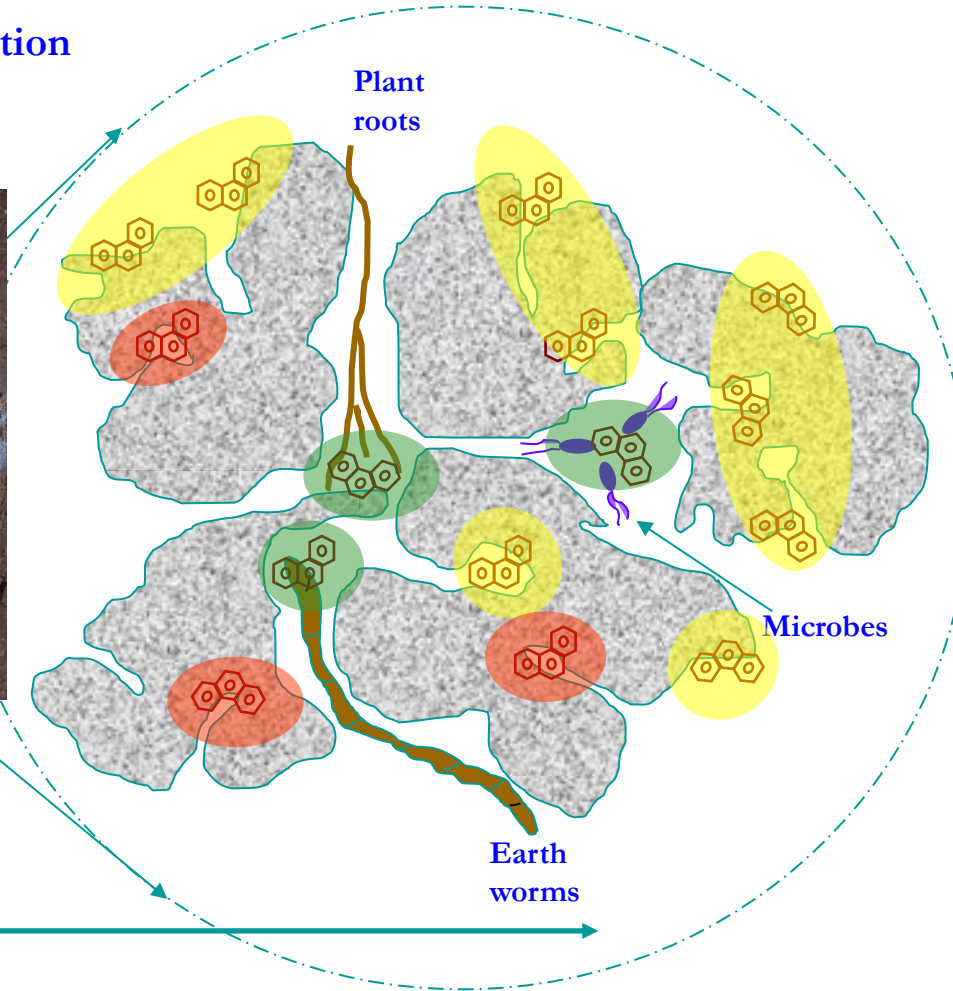
**Biodostupnost (bioavailability)** – chemická látka je biodostupná, když může být přijímána organismem z okolního prostředí (voda, sedimenty, půdy, potrava..).

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

# Biodostupnost – omezená biodostupnost hydrofóbních organických látek

Adapted from: Semple et al., 2004, *ES&T* 38: 209A

Slow biodegradation as problem





# Definice, základní pojmy

## 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, tedy procesy vedoucí k nahromadění látky v organismu jsou **výsledkem procesu daného příjmu a eliminace látky.**

# Definice, základní pojmy

## Biokoncentrace

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

# Definice, základní pojmy

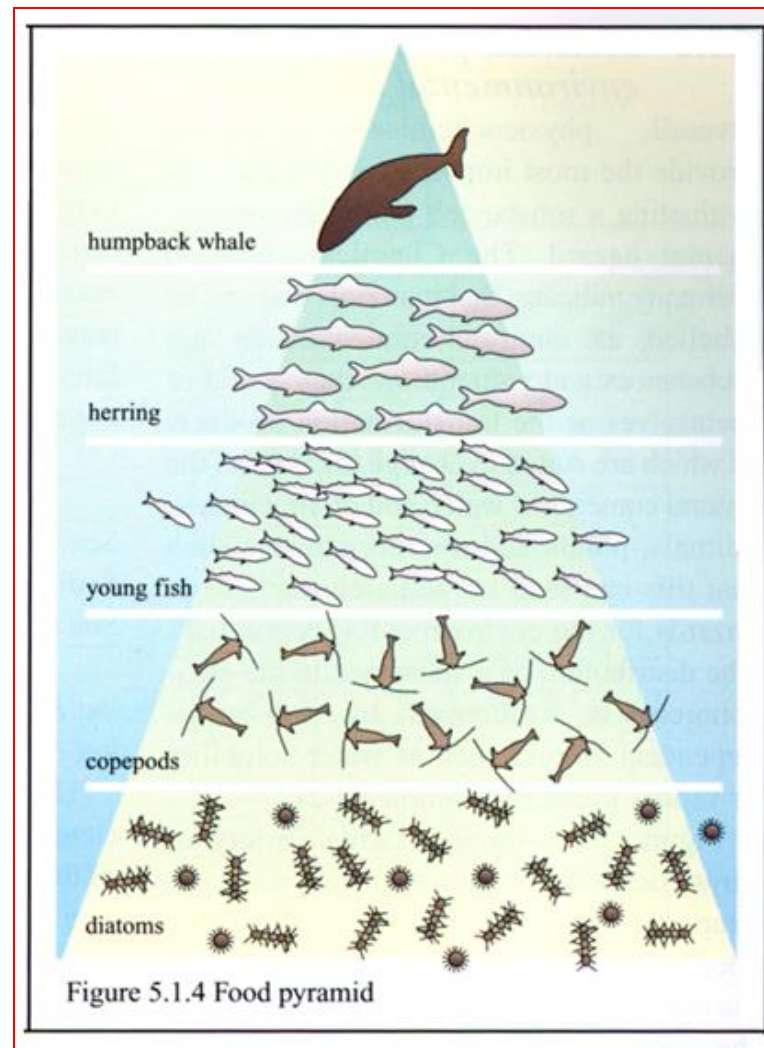
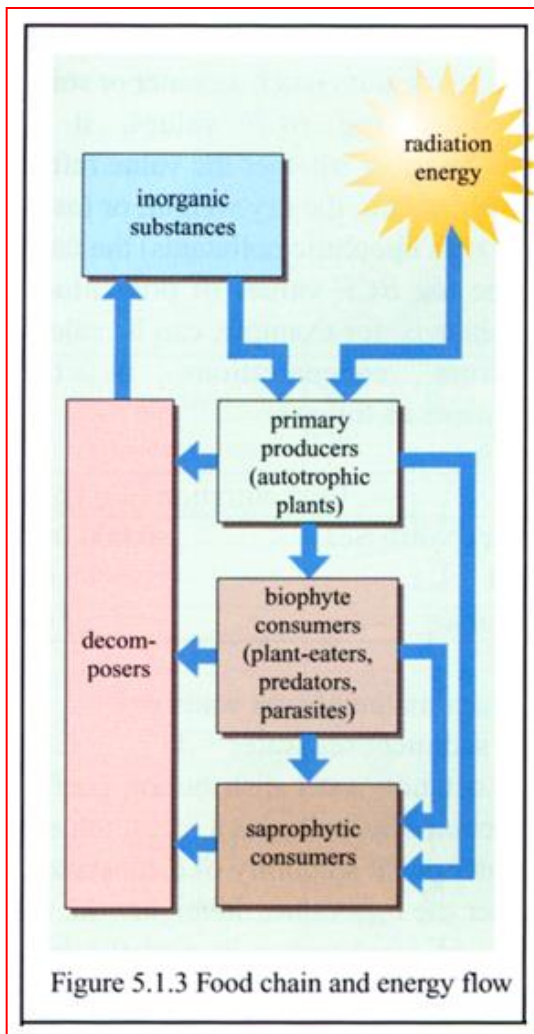
## Bioobohacování

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

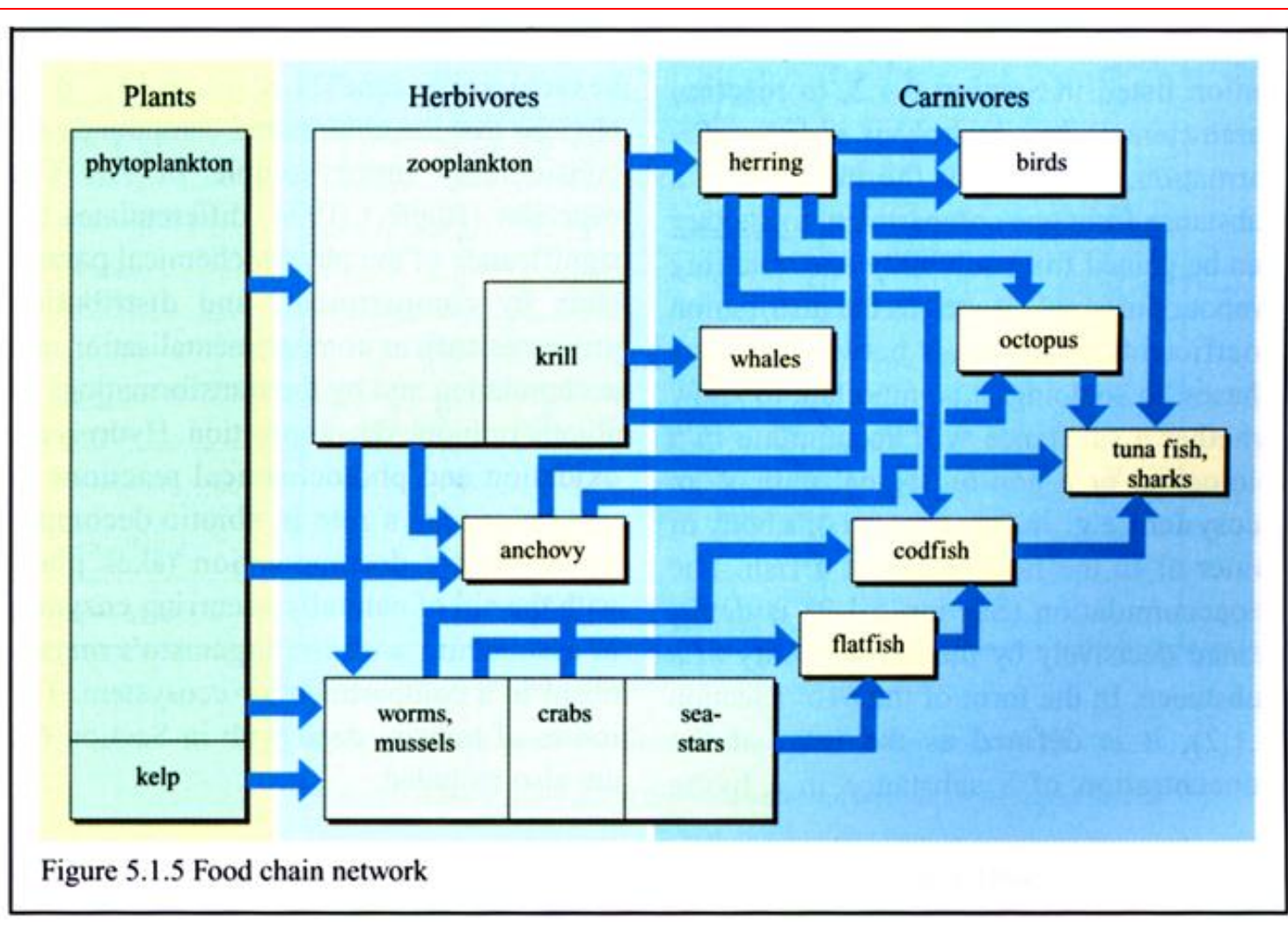
**Bioobohacování** je ovlivňováno řadou faktorů:

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

# Biokumulace, bioobohacování



# Biokumulace, bioobohacování

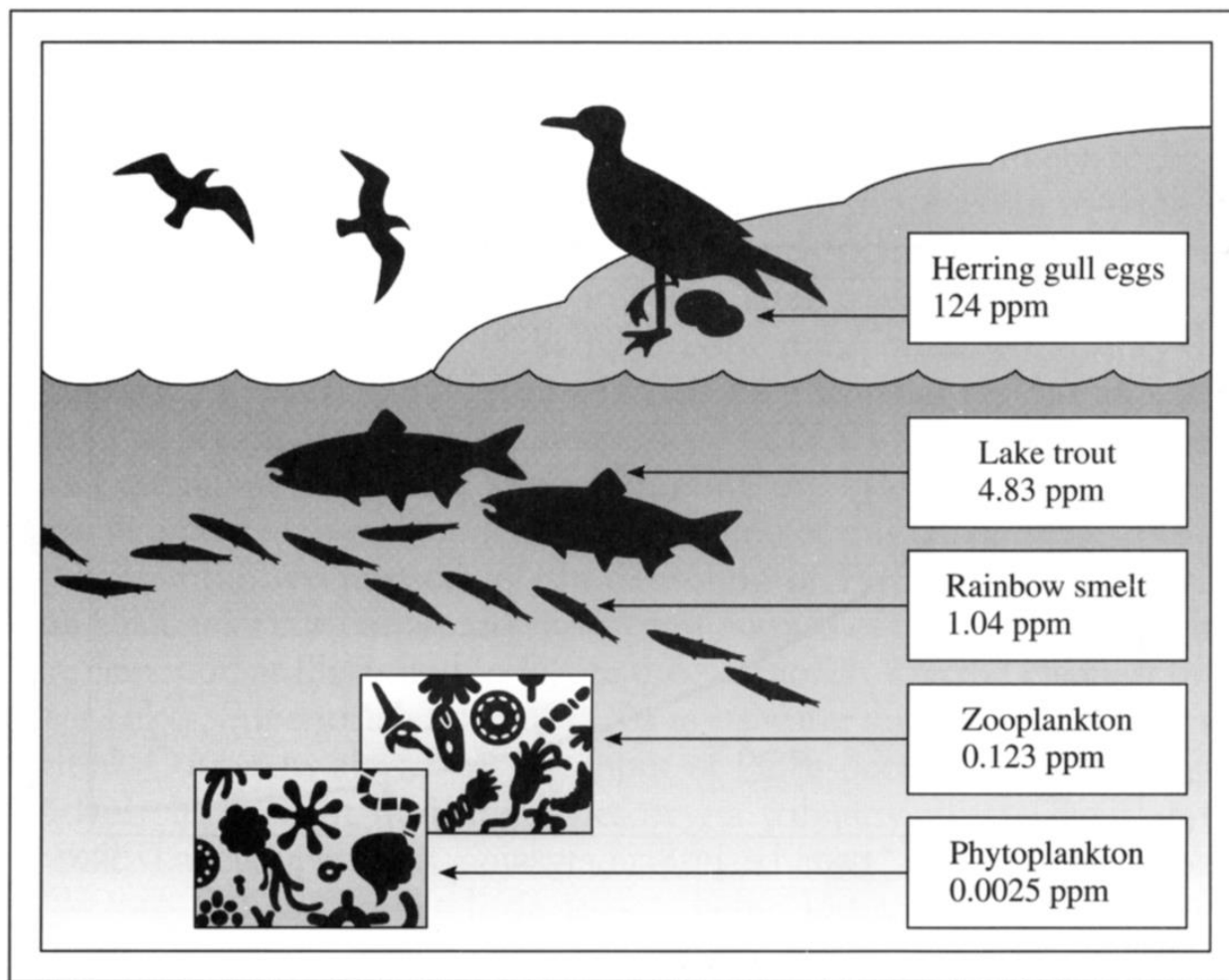


# Biokumulace, bioobohacování

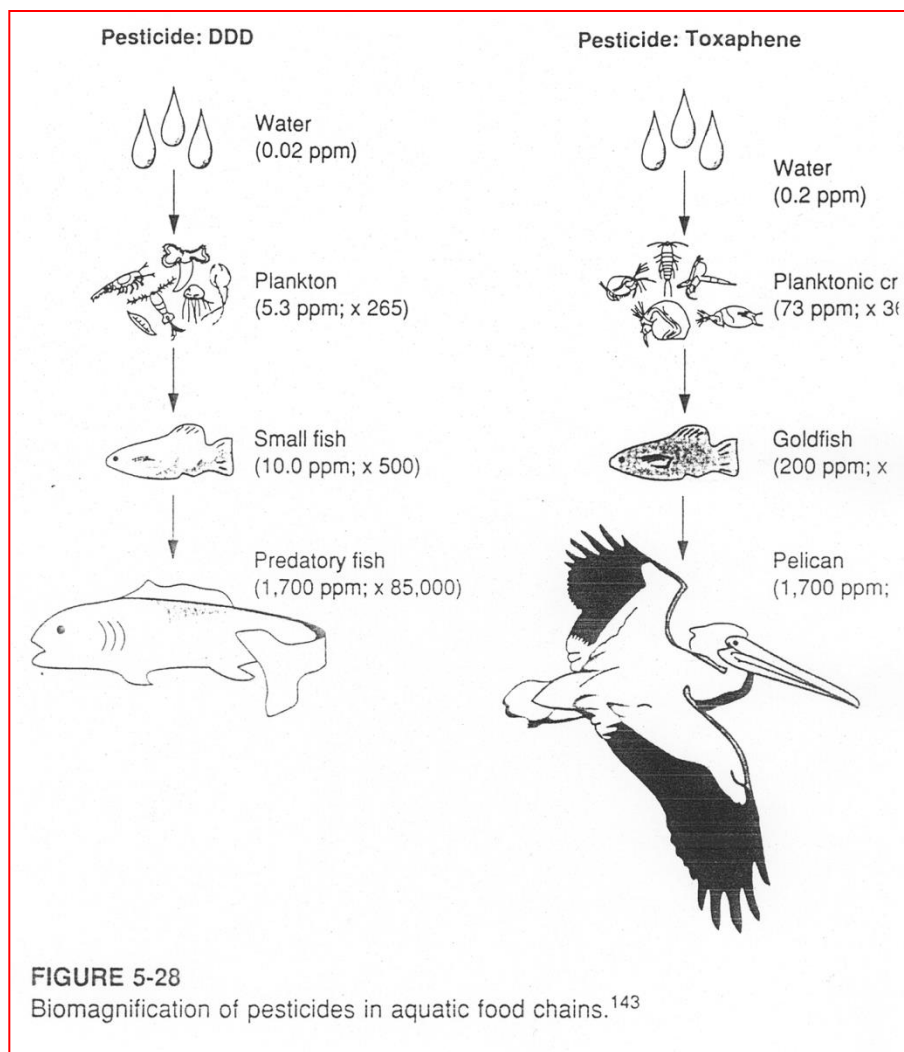
Figure 6-7

The bioaccumulation and biomagnification of PCBs in the Great Lakes aquatic food chain. (Source: *The State of Canada's Environment*. 1991.

Ottawa: Government of Canada.)



# Biokumulace, bioobohacování



# Biokumulace, bioobohacování

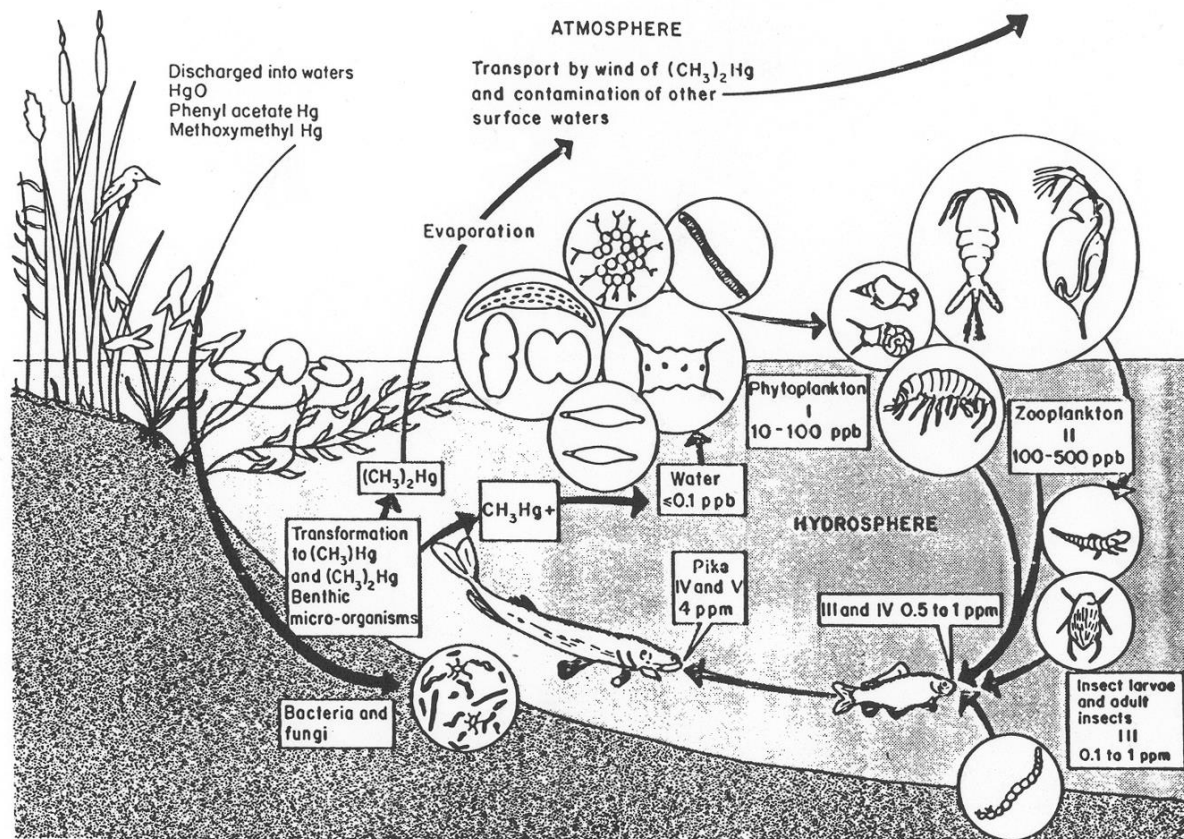
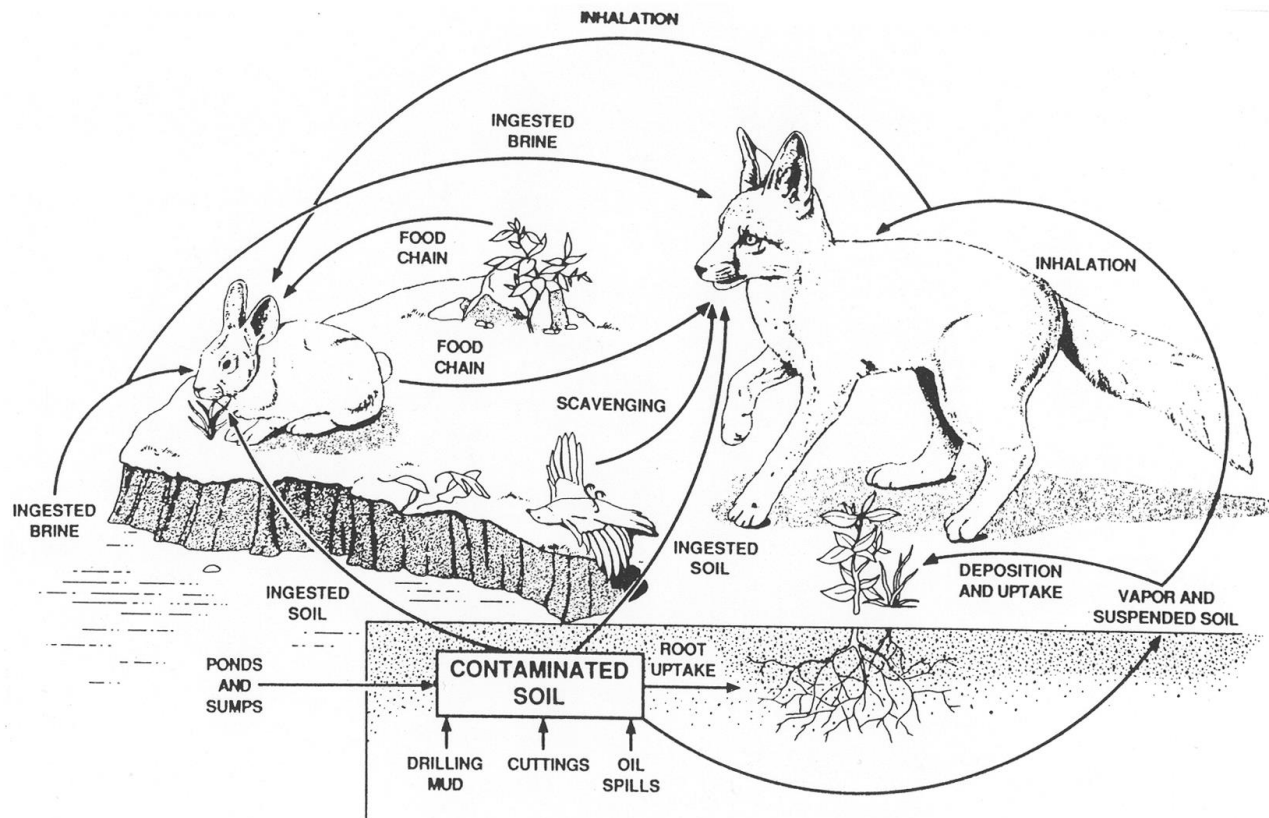


Fig. 3.24 Contamination of the food chain of the pike in Sweden (this diagram has been based on one by Duvigneaud (1974) and on analytical data on mercury contamination from various Swedish researchers). (In Ramade, 1982. Reproduced by permission of McGraw-Hill)



# Biokumulace, bioobohacování



A depiction of the diverse modes of exposure of a fox on an oil field. Contaminants occur in sumps, soils, and the air. Direct routes include inhalation, ingestion of soil, and consumption of water. Indirect routes include ingestion of prey, and scavenging of oiled animals.

# Příklad potravního řetězce

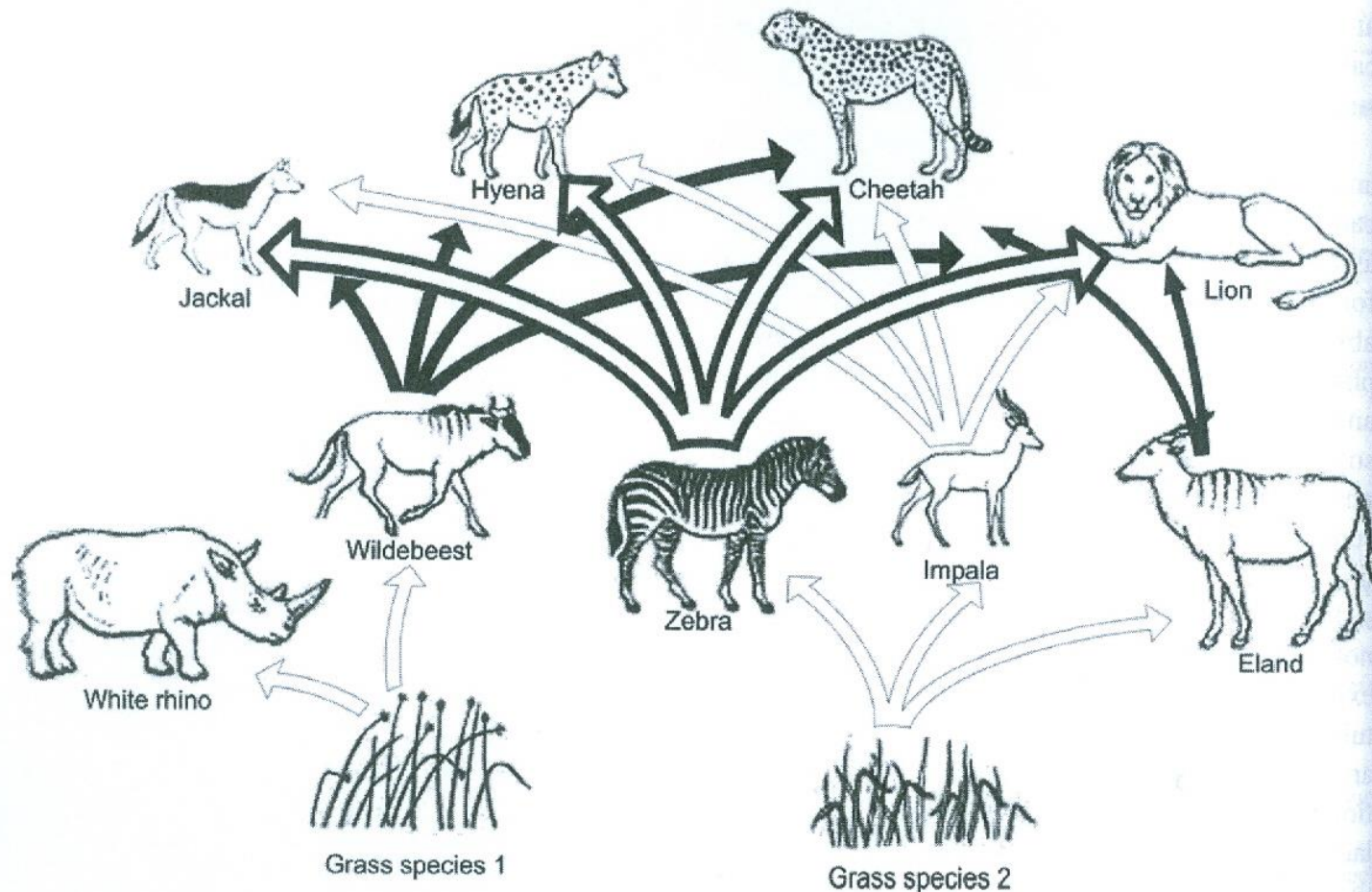


FIGURE 7.3. Sample food web.

# Definice, základní pojmy

## Biokoncentrační faktor

**Biokoncentrační faktor (bioconcentration factor) BCF** – je poměr koncentrací chemické látky nalezených v biotě ku koncentraci v zevním prostředí (voda..), ve kterém daný organismus žije.

Je uvažována expozice při ustálených podmínkách.

# Definice, základní pojmy

## Bioakumulační faktor

**Bioakumulační faktor (bioaccumulation factor) BAF** – je odvozen z poměrů koncentrací ve vodě a v potravním řetězci.

Hodnoty BCF jsou dostupnější, obecně hodnoty BAF jsou technicky obtížněji měřitelné.

Výpočty BCF i BAF jsou často velice variabilní i pro jeden druh organismu.

**Variabilita** je dána:

- ↪ testovacími podmínkami
- ↪ fyziologickým stavem testovaného organismu, který může být u polních experimentů ovlivněn sezónními variacemi, dostupností potravy a dalšími faktory.

# Definice, základní pojmy

## Rozdělovací koeficient n-oktanol-voda

Rozdělovací koeficient n-oktanol-voda (partition coefficient n-octanol-water)  $K_{OW}$  (P) – představuje odhad lipofility látky nebo odhad rozdělovací tendence mezi vodou a organickým rozpouštědlem jako jsou lipidy.

# Definice, základní pojmy

## Rozdělovací koeficient n-oktanol-voda

### Stanovení $K_{OW}$ :

- ↪ experimentálně – HPTLC, HPLC,
- ↪ výpočtem – z molekulární struktury..

$K_{OW}$  je experimentálně snadněji měřitelný než BCF či BAF, environmentálně však méně významný.

Pro ryby – obecný předpoklad – hodnota  $\log K_{OW}$  kolem 5 odpovídá BCF řádově kolem 5 000.

Hodnota  $\log K_{OW}$  vyšší než 7 musí být používána s opatrností, látka nemusí být akumulována tak, jak by z této hodnoty vyplývalo (nepřístupnost, stérické zábrany..).

# Definice, základní pojmy

## 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.

# Definice, základní pojmy

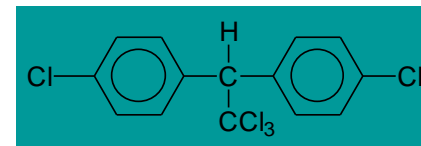
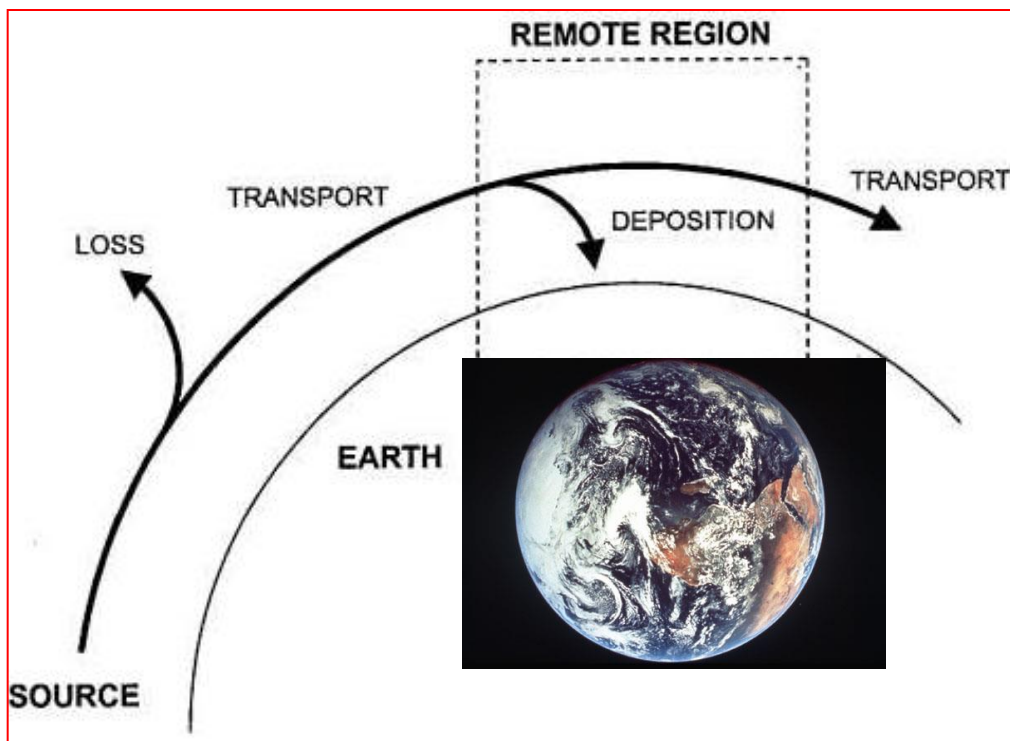
## Environmentálně nebezpečná chemická látka

☝ **Nejproblematictější vlastnosti z hlediska možného nebezpečí pro životní prostředí:**

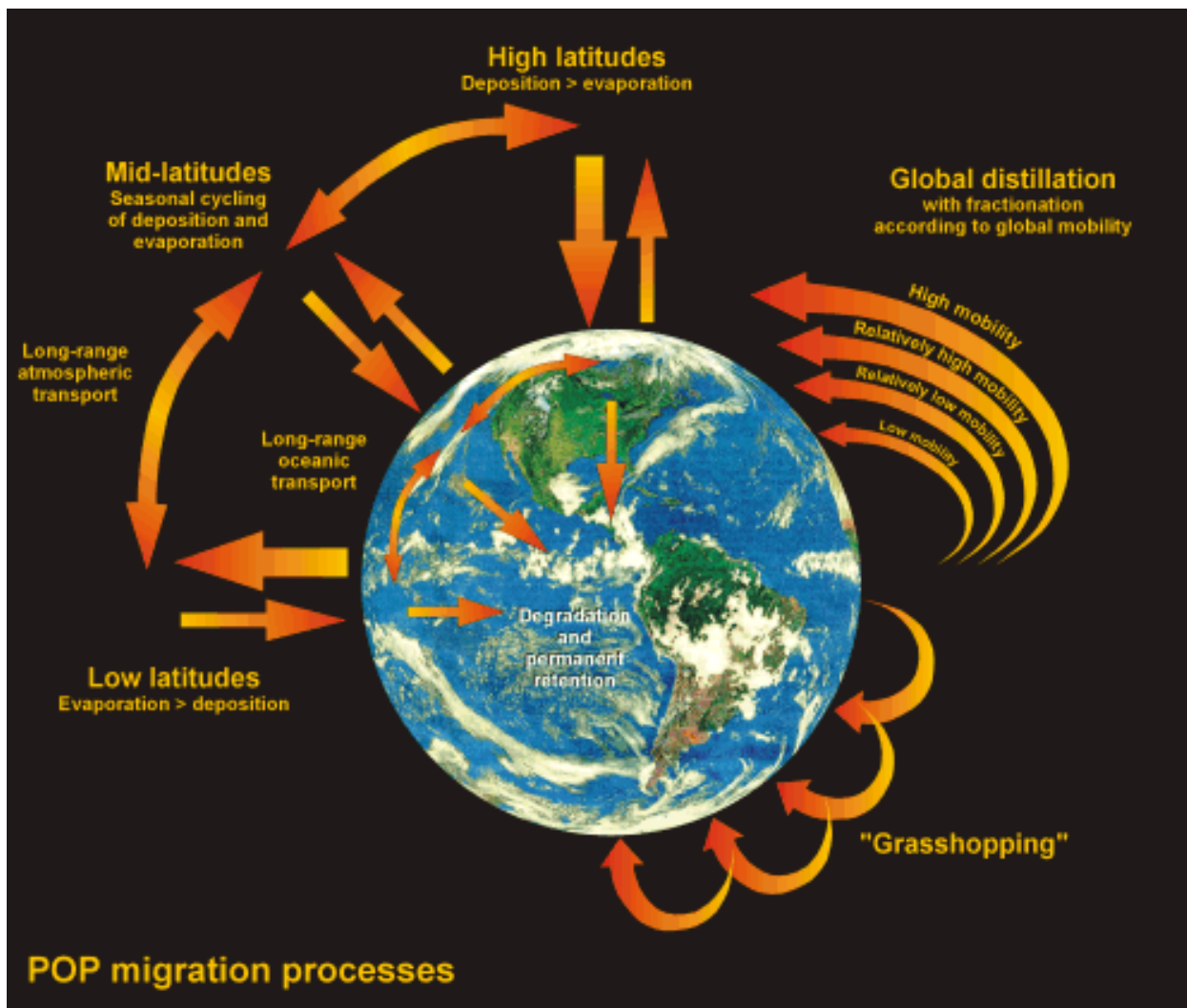
- ↪ toxicita
- ↪ persistence
- ↪ schopnost kumulace a bioakumulace
- ↪ schopnost dálkového transportu
- ↪ produkce v určitém množství
- ↪ určitá environmentální hladina



# Globální transport



# Globální transport



# Definice, základní pojmy

## 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

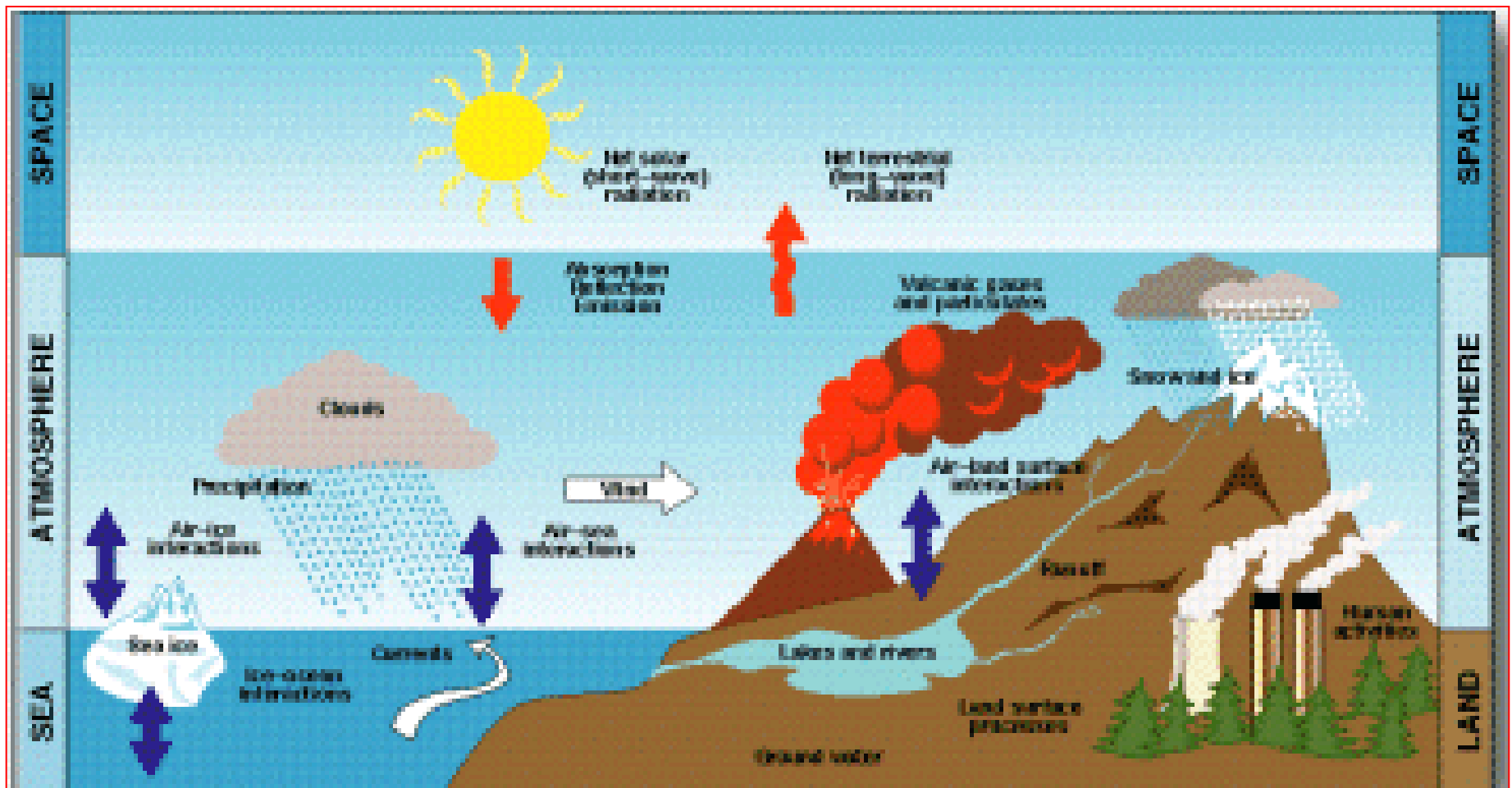


Miliardy let

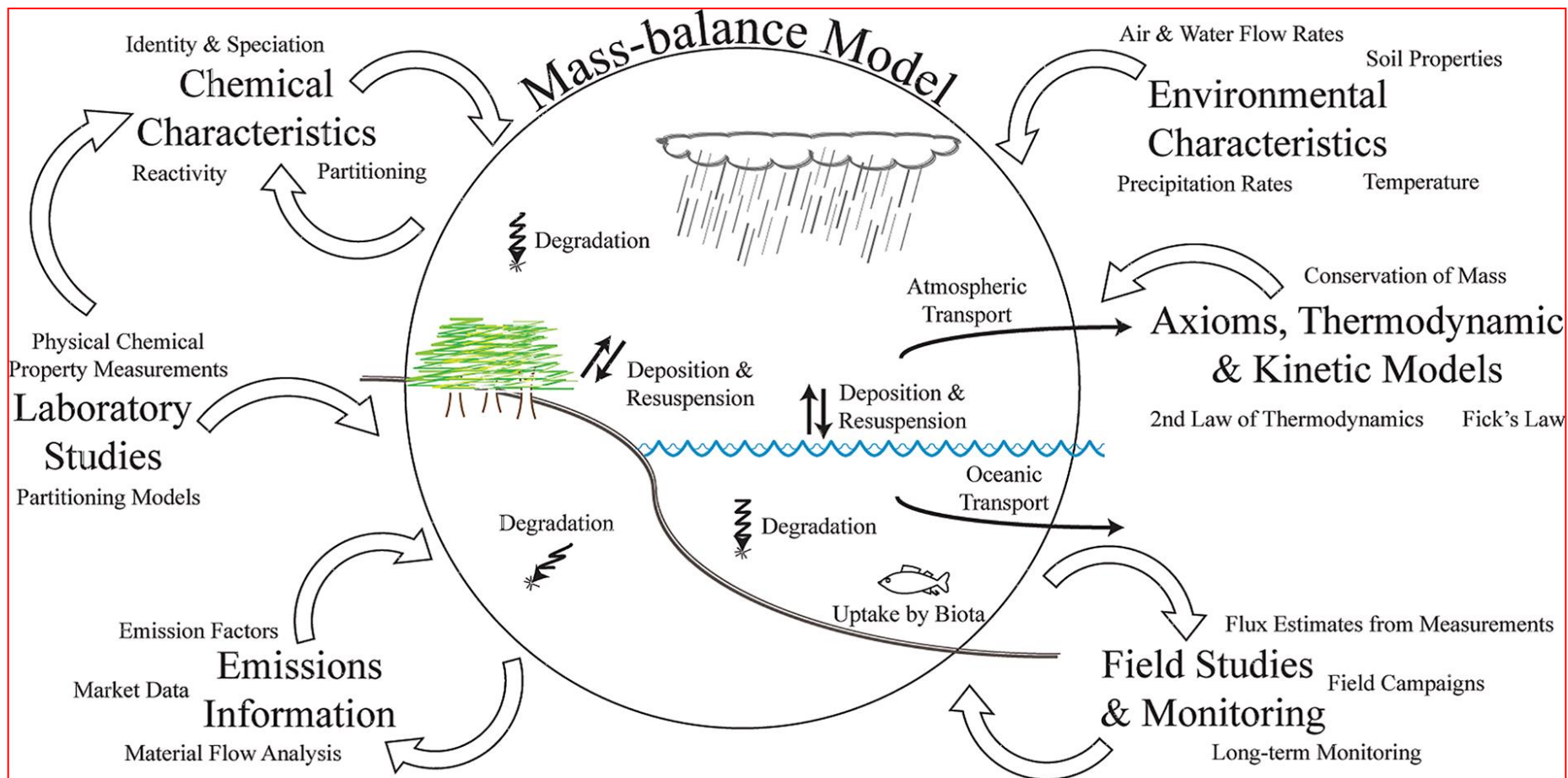
# Distribuce chemických látek v prostředí

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

# Osud chemických látek v prostředí



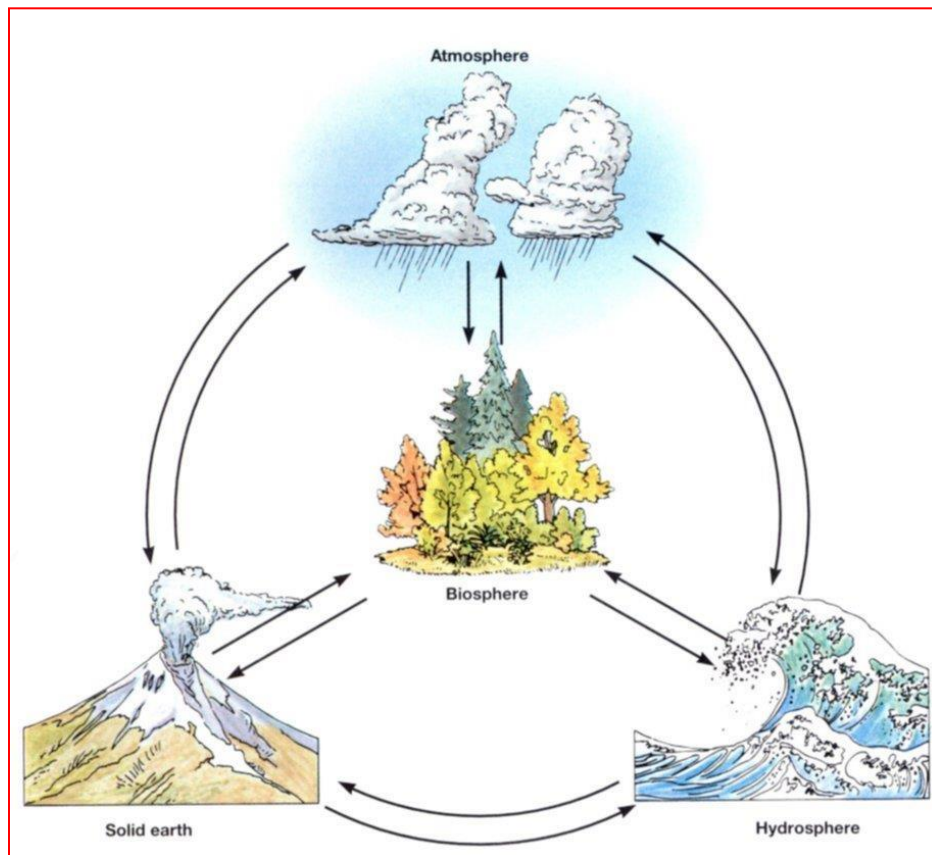
# Osud chemických látek v prostředí





# Zemský systém

Zemský systém se skládá z menších podsystemů, které spolu intenzivně „komunikují“



- atmosféra
- hydrosféra
- biosféra
- litosféra

Ty mohou být rozděleny na další podsystemy – hydrosféra = oceány, ledovce, vodní toky, podzemní voda.

# Složky prostředí

