

Chemie životního prostředí – seminář

Jaromír Literák

Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity

29. listopadu 2018

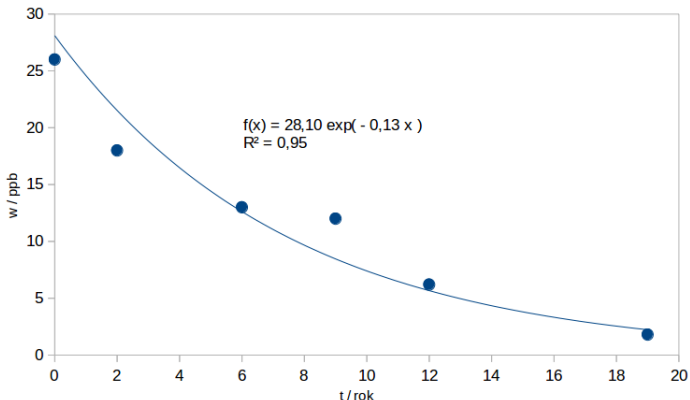


Příklad č. 1

Při elektrolytické výrobě chloru vznikaly odpady bohaté na oktachlorstyren a další polychlorované aromatické uhlovodíky. Odpady byly vypouštěny do Ontarijského jezera. Po dobu mnoha let byla sledována koncentrace oktachlorstyrenu v tělech pstruhů vylovených z tohoto jezera. Na základě výsledků prezentovaných v tabulce odhadněte **poločas života** polutantu v těle ryby.

| Rok | w/ppb |
|------|-------|
| 1986 | 26 |
| 1988 | 18 |
| 1992 | 13 |
| 1995 | 12 |
| 1998 | 6,2 |
| 2005 | 1,8 |

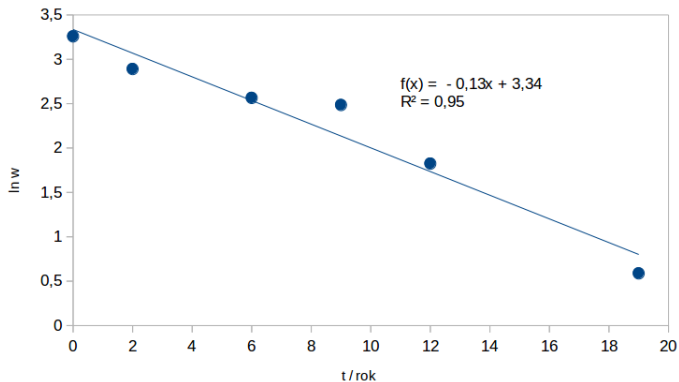
Příklad č. 1



$$k = 0,13 \text{ rok}^{-1} \quad w_0 = 28 \text{ ppb}$$

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k} = \frac{\ln 2}{0,13 \text{ rok}^{-1}} = 5,3 \text{ rok}$$

Příklad č. 1



$$k = 0,13 \text{ rok}^{-1} \quad t_{1/2} = 5,3 \text{ rok} \quad \ln w_0 = 3,3358$$

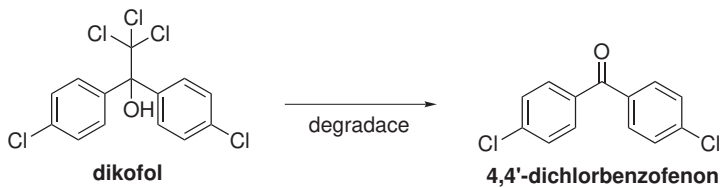
$$w_0 = e^{3,3358} = 28 \text{ ppb}$$

Příklad č. 2

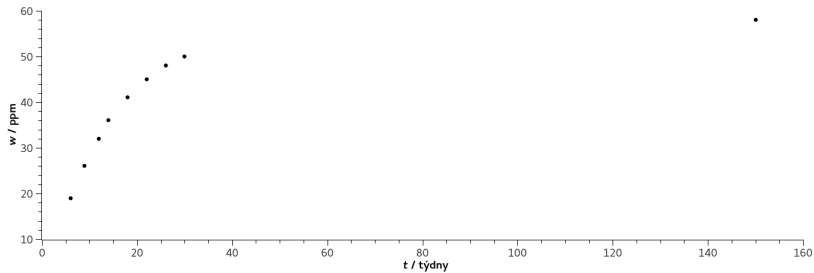
Na pole byl jednorázově aplikován akaracid dikofol. Stanovení tohoto pesticidu v půdě je obtížné. Lze však využít skutečnosti, že téměř výhradním produktem degradace tohoto pesticidu je 4,4'-dichlorbenzofenon (DCBP), který je degradován výrazně pomaleji. Po aplikaci dikofolu byla proto v půdě pravidelně stanovována koncentrace DCBP. Na základě údajů v tabulce se pokuste stanovit **poločas života** dikofolu v půdě.

| t/týden | w(DCBP)/ppm |
|----------------|--------------------|
| 6 | 19 |
| 9 | 26 |
| 12 | 32 |
| 14 | 36 |
| 18 | 41 |
| 22 | 45 |
| 26 | 48 |
| 30 | 50 |
| 150 | 58 |

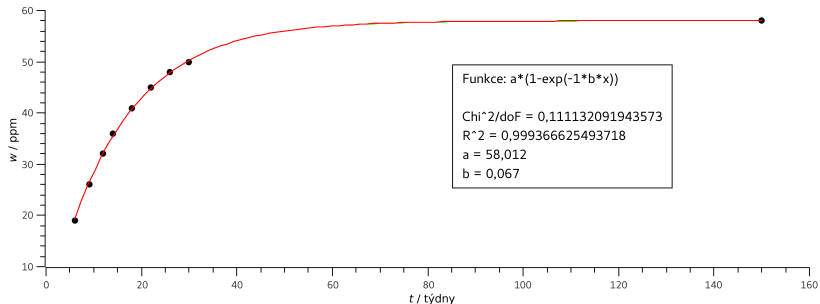
Příklad č. 2



Příklad č. 2



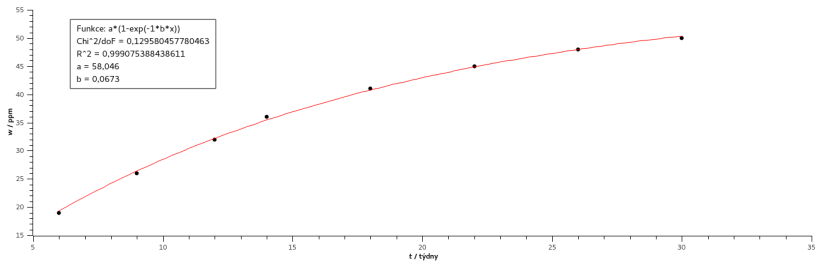
Příklad č. 2



$$k = 0,067 \text{ týden}^{-1} \quad w_{\max} = 58 \text{ ppm}$$

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{0,067 \text{ týden}^{-1}} = 10 \text{ týdnů}$$

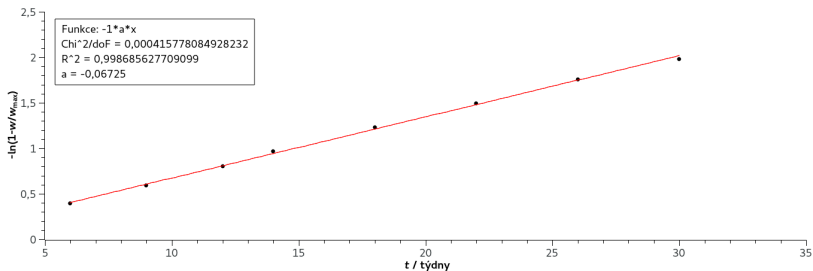
Příklad č. 2



$$-\ln\left(1 - \frac{w}{w_{max}}\right) = kt$$

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{0,067 \text{ týden}^{-1}} = 10 \text{ týdnů}$$

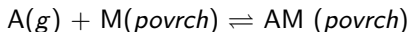
Příklad č. 2



$$-\ln\left(1 - \frac{w}{w_{max}}\right) = kt$$

$$k = 0,06725 \text{ týden}^{-1} \quad w_{max} = 58 \text{ ppm}$$

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{0,06725 \text{ týden}^{-1}} = 10 \text{ týdnů}$$



Předpoklady:

- Tvoří se jen monovrstva.
- Všechna místa jsou ekvivalentní.
- Není přítomná vzájemná interakce mezi adsorbovanými molekulami (obsazení místa neovlivní pravděpodobnost adsorpce sousedním místem).

Pokrytí povrchu:

$$\Theta = \frac{N}{N_{tot}}$$

Rychlost adsorpce:

$$\frac{d\Theta}{dt} = k_a p N_{tot} (1 - \Theta)$$

Langmuirova isoterma

Rychlost desorpce:

$$\frac{d\Theta}{dt} = -k_d\Theta N_{tot}$$

V rovnováze:

$$\frac{d\Theta}{dt} = 0 = -k_d\Theta N_{tot} = k_a p N_{tot} (1 - \Theta)$$

$$\Theta = \frac{k_a p}{k_d + k_a p}$$

$$K = \frac{k_a}{k_d}$$

$$\Theta = \frac{Kp}{1 + Kp}$$

Linearizace:

$$\frac{p}{\Theta} = \frac{1}{K} + p$$

Pro rovnováhu roztok-pevná látka:

$$\Theta = \frac{c_s}{c_{s,max}} = \frac{Kc_w}{1 + Kc_w}$$

Linearizace:

$$\frac{c_w}{c_s} = \frac{c_w}{c_{s,max}} + \frac{1}{c_{s,max}K}$$

Příklad č. 3

Byla stanovována rovnovážná koncentrace trinitrobenzenu ve vodném roztoku (c_w) a adsorbovaného na jílový minerál c_s . Naměřená data jsou v tabulce. Vyneste závislost c_s na c_w a proložte body Langmuirovu isotermu a stanovte $c_{s,max}$ a K .

| $c_w/(\mu\text{mol dm}^{-3})$ | $c_s/(\text{mmol kg}^{-1})$ |
|-------------------------------|-----------------------------|
| 0 | 0 |
| 5 | 28 |
| 10 | 40 |
| 20 | 80 |
| 70 | 138 |
| 220 | 168 |
| 325 | 172 |
| 400 | 171 |