



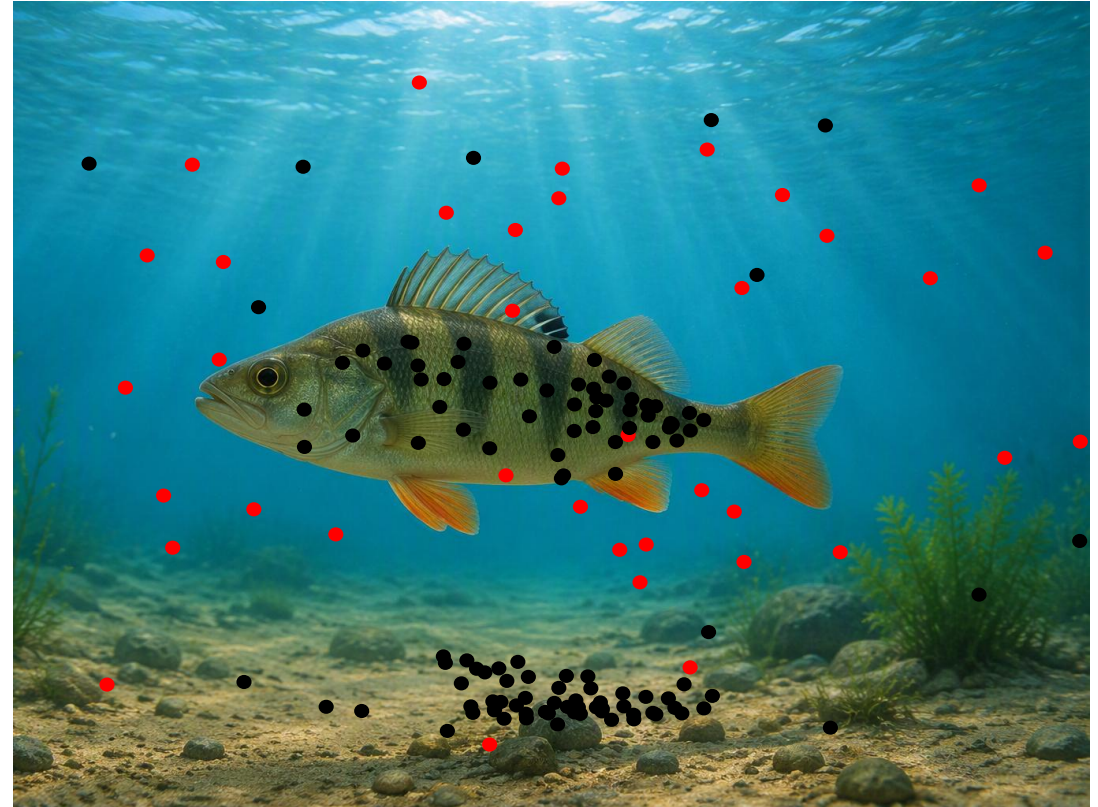
Miljö kemi

Kunskap för att hantera utmaningar
för människa och natur

Teoretisk laboration: Bestämning av fördelningskoefficienten

Löslighet påverkar bioackumulation

Fettlösliga ämnen fördelas till levande organismer och har därmed större benägenhet att bioackumuleras och biomagnifieras, dvs ansamlas i levande organismer och anrikas uppåt i näringskedjorna.



Lipofilt ämne
(fettälskande)

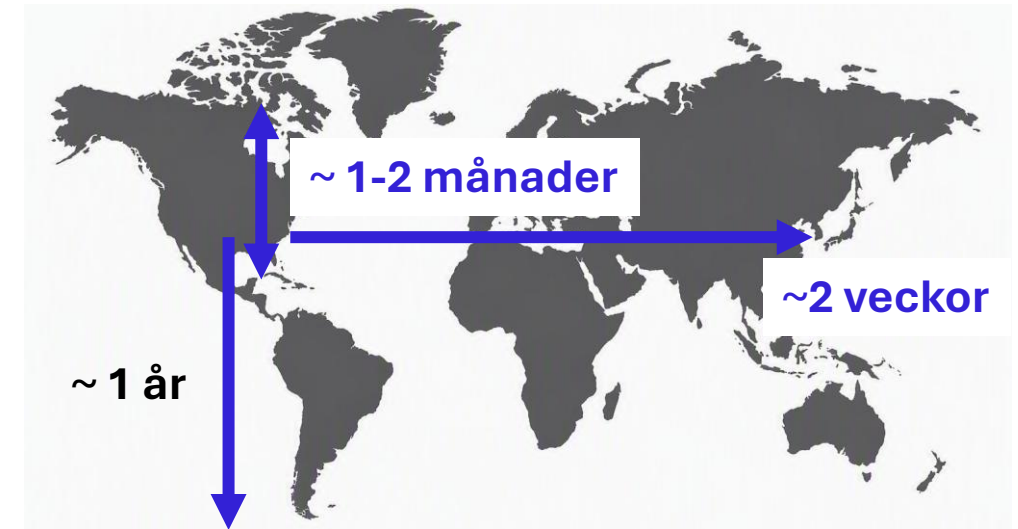


Hydrofilt ämne
(vattenälskande)

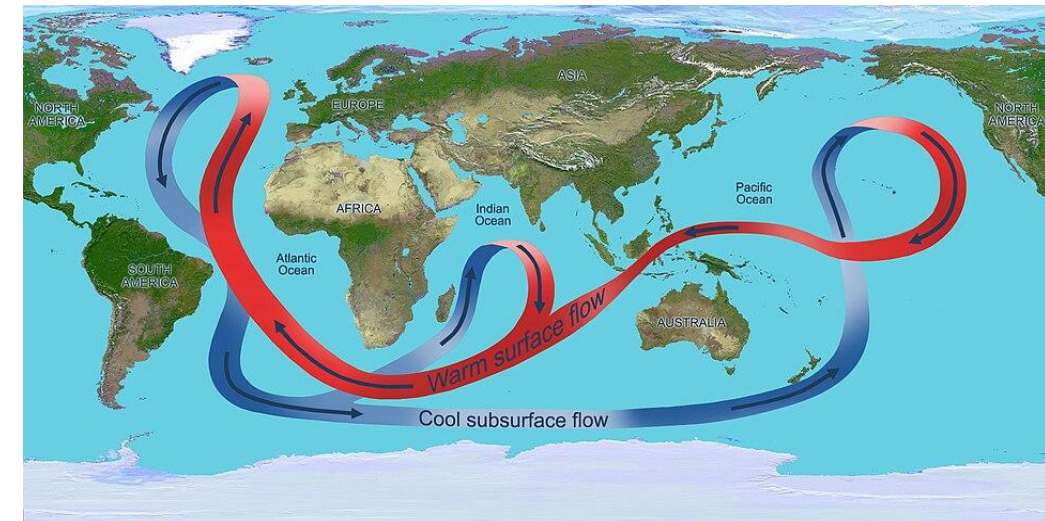


Löslighet påverkar spridning i miljön

- Löslighet påverkar fördelning mellan luft, vatten och organiska faser, såsom jord, sediment och levande organismer.
- Fördelningen påverkar både ett ämnes förmåga att spridas i miljön och dess förmåga att omvandlas (brytas ned).
- Luft rör sig snabbt (timmar, dagar, veckor).
- Hav rör sig långsammare (år, decennier, sekel).

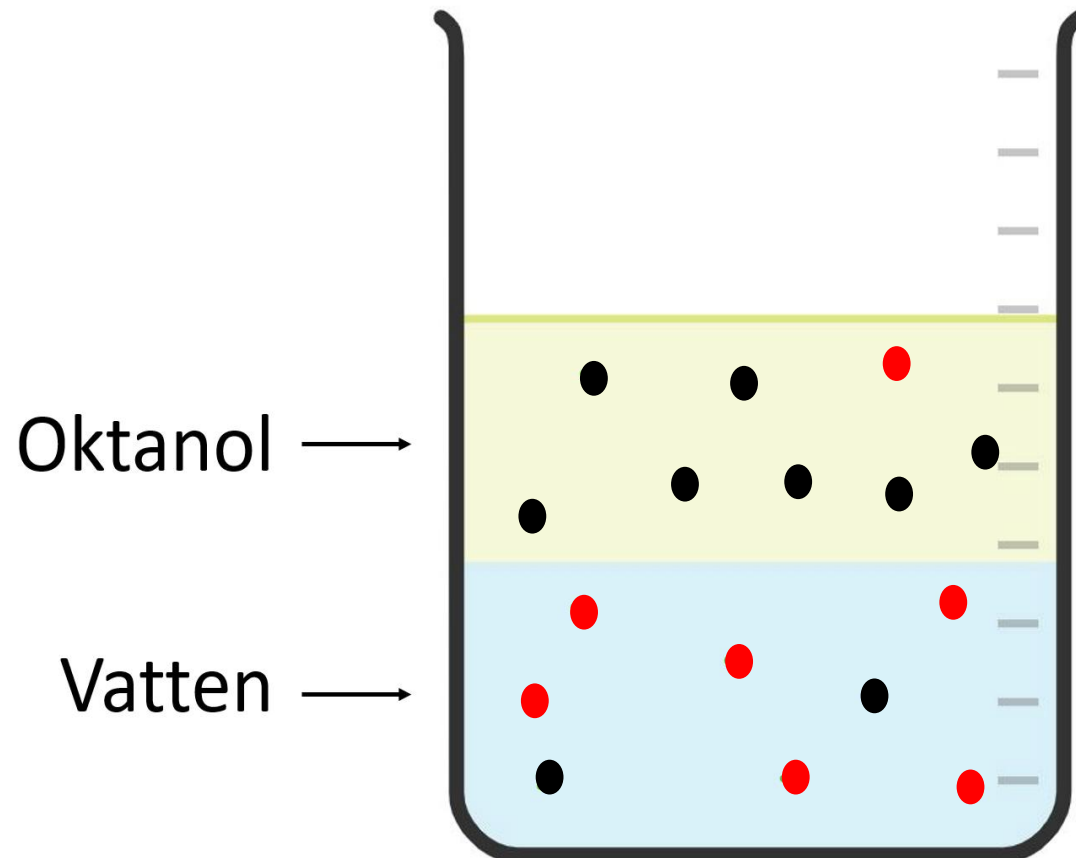


Spridning i luft Figur: Jana Johansson



Spridning i hav Figur: NASA, public domain, via [Wikimedia Commons](https://commons.wikimedia.org/)

Löslighet i vatten och fett



Schematisk bild av hur ett ämne loser sig i 1-oktanol och vatten (Ritad i chemix).

Vi kan göra experiment för att mäta ämnens fördelning mellan luft, vatten och organiska faser vid kemisk jämvikt. Den beskrivs med fördelningskonstanter.

Det ”feta” ämnet oktanol brukar användas som modell för organiska faser (fett i levande organismer, organiskt material i jord och sediment).

Hydrofilt ämne
(vattenälskande)



Lipofilt ämne
(fettälskande)



Fördelningskoefficienten, $\log K_{ow}$

Fördelningskoefficienten är ett mått på hur ett ämne löser sig i vatten (c_{vatten}) respektive fett ($c_{oktanol}$).

- Den beräknas

- $K_{ow} = \left(\frac{c_{oktanol}}{c_{vatten}} \right)$

För att få mer lätthanterliga värden används logaritmen av värdet.

$$\log K_{ow} = \log \left(\frac{c_{oktanol}}{c_{vatten}} \right)$$

Ett ämne med $\log K_{ow} = 3$ löser sig 1000 gånger bättre i oktanol än i vatten.

Modellering

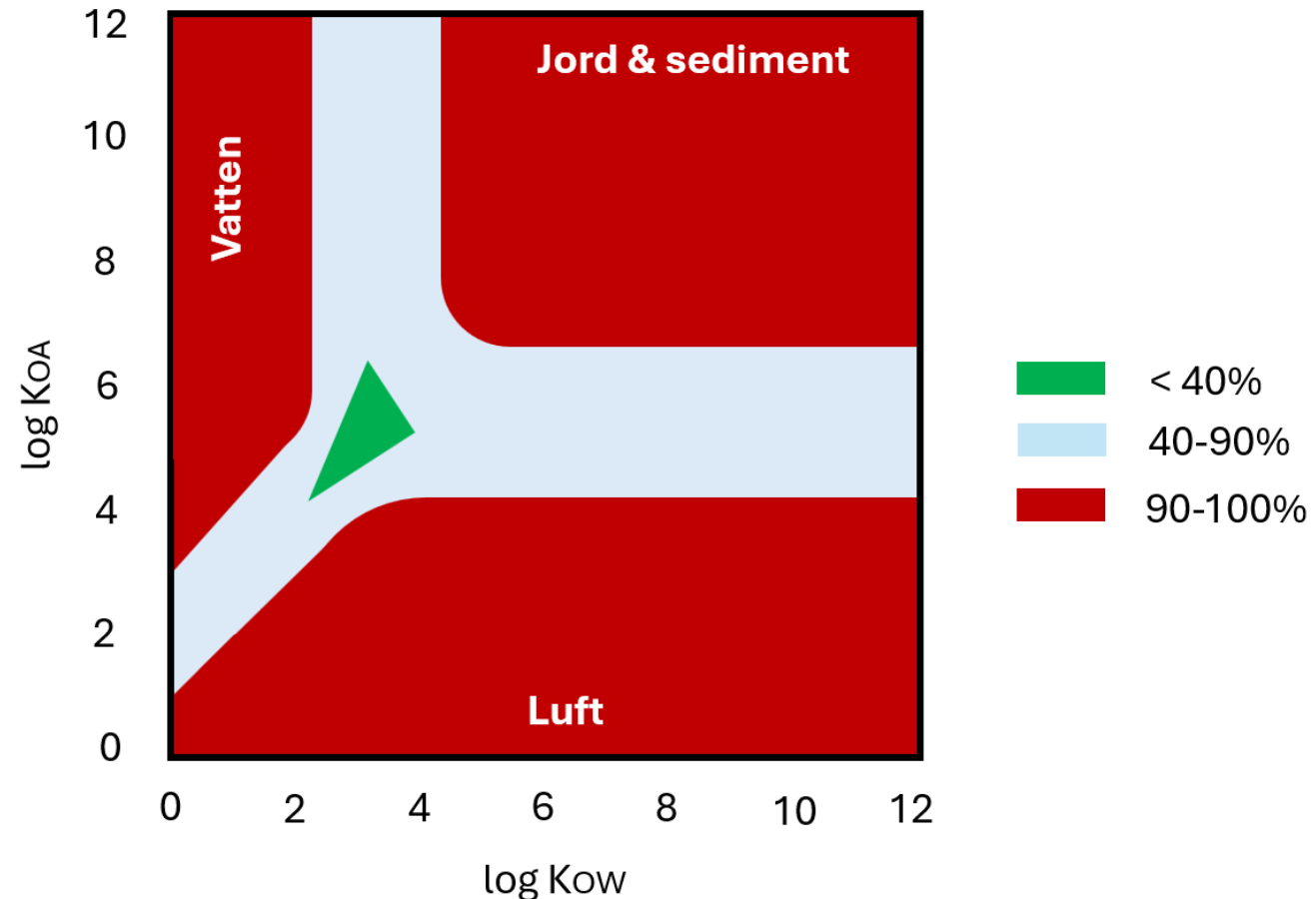
Om vi känner till ett ämnes fördelningskonstanter kan vi förutspå dess fördelning mellan faser i naturen och därmed dess "öde" i naturen.

Fördelningskonstanterna är

K_{OW} – oktanol-vatten

K_{OA} – oktanol-luft

K_{AW} – luft-vatten



Kemisk fördelningsgraf (chemical space plot)

Förenklad version av figur som presenteras i

Czub, G. et al. *Env. Sci. Technol.*

2004, 38, 2406-2412.

Användning av Kow i EUs kemikalielagstiftning REACH

- När nya ämnen ska produceras i eller importeras till EU behöver företag testa om de är säkra och skicka in information om det till EUs kemikaliemyndighet (ECHA).
- Om ett ämne har uppmätt $\log K_{ow}$ på ≥ 3 behöver dess potential för bioackumulering granskas och är $\log K_{ow}$ på ≥ 4 krävs att det görs särskilda tester, vanligen på fisk. K_{ow} används alltså för en snabb fingervisning om ett ämnes potential att bioackumuleras.
- Ett ämnes mobilitet i vatten och förmåga att lakas ur från jord kan också förutspås med hjälp av K_{ow} .
- Om ämnet visar sig uppfylla REACHs kriterier för skadliga ämnen utreds om ämnets användning ska kräva tillstånd eller begränsas.

Bestäm $\log K_{OW}$ på tre olika sätt

Din uppgift är att bestämma $\log K_{OW}$ med följande tre metoder

1. Spektrofotometrisk analys
2. TLC-analys
3. Genom att utgå ifrån ett ämne med liknande egenskaper



1. Bestäm $\log K_{ow}$ för bifenyl med spektrofotometri (teoretiskt)

1. Tillsätt en bestämd massa bifenyl i lika mycket vatten och oktanol och blanda.
2. Bestäm c_{vatten} (bifenyl) med Lambert Beer's lag.
3. Beräkna massan bifenyl i oktanol och bestäm $c_{oktanol}$ (bifenyl).
4. Beräkna $\log K_{ow}$ (bifenyl).

Lambert Beer's lag:

$$A = \varepsilon * l * c$$

A = Absorbans

ε = extinktionskoefficient. Koefficienten för bifenyl i vatten är $1,3 * 10^4 \text{ cm}^{-1} \text{ mol}^{-1} \text{ dm}^3$

l = kyvettlängd. I detta fall 1 cm.

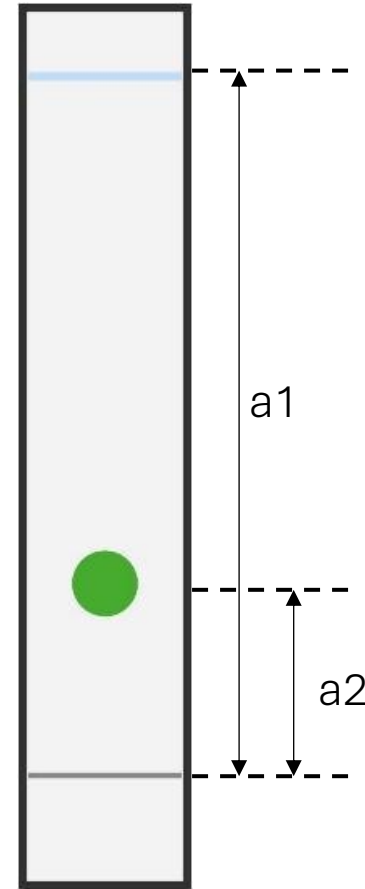
c = koncentration

2. Bestäm $\log K_{ow}$ med TLC (teoretiskt)

TLC betyder Thin Layer Chromatography
På bilden visas en schematisk TLC-platta, där avstånden a_1 och a_2 är markerade. I rutan till höger förklaras hur R_f -värdet beräknas.

Metoden för att bestämma $\log K_{ow}$ går ut på att jämföra ämnets R_f -värde med R_f -värden för ämnen med kända $\log K_{ow}$ -värden genom användning av formeln:

$$R_M = \log \left(\frac{1}{R_f} - 1 \right)$$



a_1 avstånd mellan startpunkt och lösningsmedelsfront

a_2 avstånd mellan startpunkt och centrum för provet.

$$R_f = \frac{a_2}{a_1}$$

3. Bestäm $\log K_{ow}$ utifrån liknande ämnens fördelningskonstanter

Ett tredje sätt att bestämma $\log K_{ow}$ är att utgå från ett ämne som liknar det ämne som fördelningskonstanten ska bestämmas för. Följande formel kan då användas:

$$\log K_{ow}(\text{okänd}) = \log K_{ow}(\text{liknande}) + \sum \text{fragmentvärde}$$

Fragmentvärden är värden för olika delar av molekyler. När formeln ovan används adderas och/eller subtraheras värden för de delar som skiljer molekylerna åt.



Materialet har tagits fram av Linköpings universitet,
Stockholms universitet och Globala gymnasiet
med stöd från Formas.



KRC
Kemilärarnas
resurscentrum



**Globala.
gymnasiet**



Läs mer om utbildningsmaterialet hos Kemilärarnas resurscentrum (KRC)
<https://www.su.se/enheter/kemilararnas-resurscentrum/gymnasieniva>