

Bilaga 7. Beräkning av totalkoncentration av ett organiskt ämne i vatten från den upplösta fasen provtagen med passiv provtagare

Detta är, för många av ämnena, en grov överslagsberäkning. Beräkningen ger därför inte ett exakt värde på totalkoncentrationen i vatten, men kan fungera väl för att få en ungefärlig uppfattning om den totala koncentrationen av ett ämne även om man bara provtagit med passiv provtagare. Ju fettlösligare ett ämne är (högre $\log K_{ow}$) desto större roll spelar bindning till organiskt material och ju större blir därmed skillnaden mellan upplöst fas (koncentration från passiv provtagare) och totalkoncentrationen.

Detta behövs för att kunna göra beräkningen av C_{tot} (totalkoncentration av ett ämne i vatten [ug/L]):

Ämnets $\log K_{ow}$ = logaritmerad fördelningskoefficient mellan oktanol och vatten (se Tabell x nedan)

C_w = Koncentration i upplöst fas [$ug_{\text{ämne}}/L_{\text{vatten}}$], data från passiv provtagare

Vattnets POC-halt = partikulärt organiskt kol [$kg_{oc}/L_{\text{vatten}}$]

POC-halten kan beräknas från TOC (totalt organiskt kol) och DOC (löst ”dissolved” organiskt kol). Notera därmed att TOC och DOC måste mätas i vattnet samtidigt som den passiva provtagaren ligger ute (gärna vid utsättning och upptagning). Analys av både TOC och DOC kostar ca 500 kr. POC är helt beroende av fytoplanktonsamhällets biomassa, vilket varierar kraftigt över året. POC-halten bidrar därmed även den med en stor osäkerhet. Ett möjligt tillvägagångssätt om man inte har tillgång till POC eller DOC och TOC är att man uppskattar höga respektive låga POC-halter och sen beräknar ett möjligt intervall för totalkoncentrationen utifrån dessa.

Observera att det är väldigt viktigt att man håller koll på enheterna under beräkningen.

Steg 1.

Beräkna fördelningskoefficienten för ämnet mellan organiskt kol (oc) och vatten – $\log K_{oc}$ (K_{oc} har enheten $L_{\text{vatten}}/kg_{oc}$)

Använd sambandet:

$$\log K_{oc} = a \times \log K_{ow} + b$$

Värden på a och b fås ur Tabell x, nedan.

Steg 2.

Beräkna den mängd av ämnet som är bundet till 1 kg organiskt kol – C_{oc} [$ug_{\text{ämne}} / kg_{oc}$]

Använd sambandet:

$$K_{oc} = C_{oc} / C_w \rightarrow C_{oc} = C_w \times K_{oc} \quad (C_w \text{ [} ug_{\text{ämne}}/L_{\text{vatten}} \text{)})$$

OBS! Tänk på att **inte** använda **log** K_{oc} här!!

Steg 3.

Beräkna koncentrationen av ämnet bundet till den mängd partiklar som finns i en liter vatten - C_{part} [$\mu\text{g}_{\text{ämne}}/\text{L}_{\text{vatten}}$]

Använd sambandet:

$$C_{oc} = C_{part} / \text{POC} \rightarrow C_{part} = C_{oc} \times \text{POC}$$

där POC är vattnets POC-koncentration i $\text{kg}_{oc}/\text{L}_{\text{vatten}}$

Steg 4.

Beräkna totalkoncentrationen av ämnet i vattnet (C_{tot} [$\mu\text{g}_{\text{ämne}}/\text{L}_{\text{vatten}}$])

Använd sambandet:

$$C_{tot} = C_w + C_{part}$$

Där C_w är den koncentration ($\mu\text{g}_{\text{ämne}}/\text{L}_{\text{vatten}}$) som provtas med passiv provtagare)

I tabellen nedan redovisas värden på regressionsparametrarna a och b , för beräkning av $\log K_{oc}$ från $\log K_{ow}$ under steg 1. Många av värdena på a och b är **mycket osäkra!** Den här typen av samband fungerar egentligen bara för grupper av ämnen med liknande kemisk basstruktur; t ex PCBer eller dioxiner. Prioritet, de övriga ämnen som SFÄ innefattar även en mängd "enskilda" ämnen för vilka man inte kan ta fram data för $\log K_{oc}$ och göra en regression mot $\log K_{ow}$ enligt sambandet i Steg 1. För dessa ämnen har därför rapporterade a och b -värden för andra "liknande" ämnesgrupper tagits (mycket grovt, detta kan förbättras genom att söka mer data i forskningslitteratur).

Tabell 1. Log K_{ow} samt regressionsparametrarna a och b för sambandet $\log K_{oc} = a \times \log K_{ow} + b$, för prio-ämnen, övriga ämnen och SFÄ. a och b -värden är tagna från, eller "extrapolerade" från Schwarzenbach, Gschwend & Imboden, 2003, Environmental organic chemistry. Värden på log K_{ow} är tagna från "prio-listan" (exceldokument med sammanställning av data för direktivsämnen, Ann-Sofie Wernersson, Maria Carlsson)

"Prioriterade ämnen"*** (33 st)	Log K_{ow}	a	b
Alaklor	3,4	0,42	0,93
Antracen	4,4	0,98	-0,32
Atrazin	2,8	0,49	1,05
Bensen	2,0	0,98	-0,32
penta BDE (kongener 28, 47, 99, 100, 153, 154)	7,7	0,5	0,81
Kadmium och kadmiumföreningar	beräknas ej		
Kloralkaner C10-13 (klorparaffiner)	5,4	0,42	0,93
klorfenvinfos	4,2	0,49	1,05
klorpyrifos-etyl	4,7	0,49	1,05
1,2-dikloretan	1,8	0,57	0,66
diklormetan	1,3	0,57	0,66
di-(2-etylhexyl)ftalat (DEHP)	8,4		
diuron	2,7	0,62	0,84
endosulfan	3,5	0,42	0,93
fluoranten	4,9	0,98	-0,32
hexaklorbensen (HCB)	5,7	0,74	0,15
hexaklorbutadien (HCBD)	4,7	0,96	-0,23
hexaklorcyklohexan (HCH)	4,3	0,42	0,93
isoproturon	2,8	0,62	0,84
bly och blyföreningar	beräknas ej		

kvicksilver och kvicksilverföreningar	beräknas ej		
naftalen	3,2	0,98	-0,32
nickel och nickelföreningar	beräknas ej		
4-nonylfenol	6		
4-(1,1',3,3'-tetrametylbutyl)-fenol (oktylfenol)	5,3		
pentaklorbensen	5,2	0,74	0,15
pentaklorfenol	4,7	0,89	-0,15
benso(a)pyren	6,1	0,98	-0,32
benso(b)fluoranten	6,1	0,98	-0,32
benso(k)fluoranten	6,1	0,98	-0,32
benso(g,h,i)perylen	6,7	0,98	-0,32
Indeno(1,2,3-cd)pyren)	6,7	0,98	-0,32
Simazin	2,4	0,49	1,05
Tributyltenn katjon	beräknas ej		
Triklorbensener	3,9	0,74	0,15
Triklormetan (kloroform)	1,5	0,57	0,66
Trifluralin	5,3	svår! Förekommer troligt i jonform	
8 övriga ämnen	logKow	a	b
DDT totalt			
para-para-DDT	6,8	0,42	0,93
aldrin	6,8	0,42	0,93
dieldrin	5,5	0,42	0,93
endrin	5,5	0,42	0,93
isodrin	6,8	0,42	0,93

koltetraklorid (tetraklormetan)	3,4	0,57	0,66
tetrakloretylen (tetrakloreten, perkloretylen)	3	0,96	-0,23
trikloretylen (trikloreten)	2,5	0,96	-0,23
Särskilt förorenande ämnen (NV 5799)	logKow	a	b
Krom	beräknas ej		
Zink	beräknas ej		
Koppar	beräknas ej		
Bronopol	-0,64		
Irgarol 1051	4,1	0,49	1,05
Triclosan	4,6	0,89	-0,15
C14-17 kloralkaner; MCCP	7,4	0,42	0,93
Icke dioxinlika PCBer		0,74	0,15
Dioxinlika PCBer, dioxiner och furaner	beräknas ej	0,74	0,15
PFOS	beräknas ej		
HBCD	7,7	0,5	0,81
Bisfenol A	3,6	0,49	1,05
Nonylfenoletoxilater (summan av NP-TEQ)	beräknas ej		
Aklonifen	3,9	0,49	1,05
Bentazon	1,7	0,49	1,05
Cyanazin	2,5	0,49	1,05
Diflufenikan	3,5	0,49	1,05

Diklorprop	3	0,49	1,05
Dimetoat	0,28	0,49	1,05
Fenpropimorf	5,5	0,49	1,05
Glyfosat	-4,5	0,49	1,05
Kloridazon	0,76	0,49	1,05
MCPA	2,5	0,49	1,05
Mekoprop	2,9	0,49	1,05
mekoprop p	2,9	0,49	1,05
Metamitron	1,44	0,49	1,05
Metribuzin	1,5	0,49	1,05
Metsulfuronmetyl	2	0,49	1,05
Pirimikarb	1,4	0,49	1,05
Sulfusulfuron	0,99	0,49	1,05
Tifensulfuronmetyl	1,3	0,49	1,05
Tribenuronmetyl	2,6	0,49	1,05

Referens

Schwarzenbach, Gschwend & Imboden, 2003, Environmental organic chemistry. John Wiley and Sons, Inc., Holboken, New Jersey.