Analiza próbek środowiskowych i przemysłowych, W03CHA-SI0015L

Ćwiczenie 3:

WYZNACZANIE WSPÓŁCZYNNIKA PODZIAŁU *n*-oktanol/woda DLA WYBRANYCH CHEMICZNYCH ZANIECZYSZCZEŃ ŚRODOWISKA

(opracowanie: Barbara Kułakowska-Skowronek, Anna Leśniewicz)

Cel ćwiczenia

Celem ćwiczenia jest eksperymentalne wyznaczenie współczynnika podziału n-oktanol/woda P_{OW} dla acetofenonu i trichloroetenu (skróty: Tri, TCE). W ramach ćwiczenia zostanie przeprowadzona ekstrakcja badanych związków w dwufazowym układzie n-oktanol/woda, a następnie oznaczone zostaną ich stężenia w fazie wodnej metodą spektrofotometrii UV-Vis na podstawie krzywych kalibracyjnych. Stężenia badanych związków w fazie organicznej zostaną obliczone z bilansu masy. Na podstawie uzyskanych danych zostaną wyznaczone wartości P_{OW} i log P_{OW}, a otrzymane wyniki zostaną porównane z wartościami literaturowymi.

WPROWADZENIE

Charakterystyka badanych związków

Acetofenon jest najprostszym ketonem alifatyczno-aromatycznym. Jest stosowany w przemyśle perfumeryjnym jako środek zapachowy mydeł, detergentów, kremów, perfum. Ponadto jest substratem do otrzymywania wielu związków organicznych, znajduje zastosowanie jako katalizator w procesie polimeryzacji olefin, w syntezie organicznej jako fotouczulacz, rozpuszczalnik dla żywic, estrów celulozy i plastyfikatorów, a także dodatek do lodów, puddingów, gum do żucia i żelatyny. Był stosowany jako środek nasenny pod nazwą hypnon. Acetofenon działa depresyjnie na ośrodkowy układ nerwowy ludzi i zwierząt, a jego duże dawki mogą powodować śmierć z powodu niewydolności oddechowej.

Trichloroeten (Tri) należy do licznej grupy węglowodorów chlorowanych. Są to tzw. ciecze ciężkie ze względu na ich gęstość większą od wody. Związki te ze względu na swoje specyficzne właściwości fizykochemiczne stanowią uciążliwe zanieczyszczenie, które np. dyskwalifikuje przydatność wód do spożycia. Tri wykorzystywany jest przy ekstrakcji tłuszczów z nasion, czyszczeniu i odtłuszczaniu metali, w przemyśle gumowym, farb, lakierów i atramentów drukarskich. Pary trichloroetenu drażnią błony śluzowe nosa i gardła, powodują podrażnienia skóry i oczu, działają negatywnie na czynności ośrodkowego układu nerwowego.

Wzory strukturalne obu związków przedstawiono na Rysunku 1., zamieszczonym poniżej.

(a) (b)



Rysunek 1. Wzory strukturalne związków stosowanych w ćwiczeniu; (a) acetofenon – C_8H_8O; (b) trichloroeten – C_2HCl_3.

Współczynnik podziału i lipofilowość

Woda i n-oktanol tworzą układ dwóch cieczy o ograniczonej wzajemnej rozpuszczalności – można je traktować jako praktycznie niemieszające się. Acetofenon i Tri są substancjami rozpuszczalnymi zarówno w wodzie, jak i w n-oktanolu. Wprowadzenie acetofenonu lub Tri do układu tych dwóch cieczy rozpoczyna proces przenoszenia substancji przez granicę faz woda/n-oktanol i jej rozdział pomiędzy obie fazy. Po osiągnięciu równowagi termodynamicznej, w stałej temperaturze, stosunek stężeń substancji w obu fazach przyjmuje, zgodnie z prawem podziału Nernsta, wartość stałą, charakterystyczną dla danego układu [1]:

$$P = \frac{c_i^{org}}{c_i^{w}} = const \qquad (1)$$

gdzie: c_i^{org} oznacza równowagowe stężenie substancji i w fazie organicznej, a c_i^{w} - równowagowe stężenie substancji w fazie wodnej. Współczynnik podziału jest wielkością bezwymiarową.

Stała ***P*** nosi nazwę ***współczynnika podziału***.

Wartość współczynnika podziału:
- zależy od rodzaju składników układu (cieczy i substancji rozpuszczonej) oraz od temperatury i ciśnienia, czyli jest cechą charakterystyczną dla danego układu dwóch rozpuszczalników i jednej substancji rozpuszczonej,
- nie zależy natomiast od ilości (masy, stężenia, objętości) składników układu.

Prawo podziału Nernsta jest słuszne, gdy:
- ciecze nie mieszają się ze sobą (lub mieszają się w ograniczonym stopniu),
- roztwory są rozcieńczone (stężenie c ≈ aktywność),
- temperatura jest stała,
- w żadnej z faz nie zachodzą procesy dysocjacji i asocjacji, czyli substancja występuje w takiej samej formie w obu fazach.

Obecność innych składników w układzie może wpływać na aktywność substancji oraz na obserwowaną wartość współczynnika podziału. Dlatego przy wyznaczaniu ***P*** należy zachować ściśle określony skład faz i warunki pomiaru.

Wynikający z prawa podziału Nernsta współczynnik podziału ***P*** danej substancji pomiędzy fazami organiczną i wodną jest najczęściej używanym parametrem lipofilowości substancji. Terminem ***lipofilowość*** nazywa się powinowactwo cząsteczki do fazy organicznej, czyli preferowanie przez cząsteczkę tej fazy nad fazę wodną. Lipofilowość jest niezwykle ważnym parametrem charakteryzującym substancje czynne biologicznie jakimi są lekarstwa, trucizny, kosmetyki, używki, środki ochrony roślin, konserwanty będące w żywności czy inne ksenobiotyki (substancje chemiczne obce dla organizmów żywych, celowo produkowane przez nasze społeczeństwo).

Szczególnie użytecznym układem dla wyznaczania wartości współczynnika podziału różnych związków aktywnych biologicznie jest układ ekstrakcyjny *n*-oktanol/woda.
Prace badawcze prowadzone w tym temacie w ostatnich kilkudziesięciu latach dowodzą bowiem, że wyznaczana dla tego układu lipofilowość jest w dużym stopniu skorelowana z lipofilowością układów w ustroju biologicznym oraz środowisku naturalnym. Obecnie współczynnik podziału oktanol/woda (P_{ow}) jest jednym z podstawowych parametrów wyznaczanych dla nowo-syntetyzowanych substancji o znaczeniu biologicznym.

Lipofilowość jest jednym z ważnych czynników determinujących zachowanie substancji chemicznej *in vivo*. Bogate w lipidy błony komórkowe są łatwo penetrowane przez substancje lipofilowe, charakteryzujące się wysokim współczynnikiem podziału oktanol/woda.

W konsekwencji, lipofilowość leku czy trucizny ma istotne znaczenie dla procesów jego dystrybucji w organizmie, szczególnie na szybkość jego przenikania przez lipofilowe błony komórkowe i wchłaniania do krwioobiegu.
Lipofilowość jest także wykorzystywana do przewidywania efektywności działania związków czynnych w kosmetyce. Badanie współczynników podziału jest wstępnym etapem badania penetracji substancji w warstwę rogową naskórka. Obecnie wiadomo, że współczynnik podziału oktanol/woda jest jednym z parametrów wpływających na zdolność substancji chemicznej do penetracji warstwy rogowej naskórka. Badania dowodzą, że cząsteczki o zbalansowanym współczynniku oktanol - woda wnikają w głąb skóry najbardziej efektywnie [2, 3].

Jednym z najważniejszych zastosowań współczynnika podziału związku między n-oktanolem a wodą jest szacowanie zagrożeń wynikających z chemicznego zanieczyszczenia środowiska. Wartość współczynnika podziału oktanol/woda wyznaczona dla typowych zanieczyszczeń środowiska mieści się w bardzo szerokim zakresie, od 0,01 (związki hydrofilowe) do 10^{10} dla substancji lipofilowych. Tak szeroki zakres zmienności wartości współczynnika spowodował, że przyjęto wyrażać go w formie logarytmicznej (**log P_{OW}**).
Substancja, która cechuje się wysoką lipofilością, tzn. łatwo rozpuszcza się w tłuszczach, może być bardzo groźna dla środowiska. Substancje lipofilowe są bowiem łatwo absorbowane i osadzane na drobinach materii (zarówno ożywionej, jak i cząsteczkach substancji organicznych i nieorganicznych). Związki chemiczne, które są lipofilowe i zarazem lotne zwykle przemieszczają się z wody do atmosfery. Substancje lipofilowe mogą łatwo przenikać przez błony komórkowe i gromadzić się w organizmie, zwłaszcza w jego tkance tłuszczowej. Trwałe substancje o tych właściwościach akumulują się w tkankach tłuszczowych organizmów żywych. W miarę przemieszczania się w górę łańcucha pokarmowego, stężenia tych substancji mogą zwiększać się o współczynnik wynoszący wiele tysięcy lub milionów, a także mogą szkodzić ludziom i innym organizmom nawet w tych bardzo niskich stężeniach, w jakich występują one obecnie w środowisku, dzikiej przyrodzie i u ludzi.
Powszechnie znanymi przykładami takich groźnych dla środowiska substancji, charakteryzujących się wysoką lipofilowością są DDT (azotox), związki PCB (polichlorowane dwufenyle) i dioksyny oraz furany. Do tej grupy substancji należą również niektóre metale ciężkie, które mogą tworzyć lipofilowe związki metaloorganiczne, jak np. rtęć.

Efekt oddziaływania związku chemicznego zależy od jego stężenia w środowisku i czasu działania. Aby ocenić narażenie środowiska na związki chemiczne, niezbędna jest ich ocena pod względem biokoncentracji (szerzej bioakumulacji). **Biokoncentracja** to wzrost stężenia związku chemicznego w organizmie wskutek absorpcji tkankowej, który zachodzi szybciej od procesu metabolizmu i wydalania. Biokoncentracja dotyczy tylko środowiska wodnego, gdy brane są pod uwagę inne przedziały środowiskowe, tj. powietrze i gleba oraz kontakt drogą pokarmową – mówi się wtedy o **bioakumulacji**. Zdolność do bioakumulacji wzrasta ze wzrostem rozpuszczalności w tłuszczach. Stąd też, sposobem szacowania ryzyka bioakumulacji przy kontakcie organizmów wodnych z substancją chemiczną jest pomiar współczynnika biokoncentracji (BCF - Bioconcentration Factor) lub współczynnika bioakumulacji (BAF - Bioaccumulation Factor). Istnieje wiele metod oznaczania BCF lub BAF, jednakże są one drogie, ponieważ wymagają zmierzenia metabolizmu organizmu. Dużo prostszą metodą jest oznaczenie chemiczne (lub obliczenie na podstawie struktury chemicznej związku) współczynnika podziału n-oktanol/woda. Układ n-oktanol/woda stosuje się jako model opisujący powinowactwo substancji do fazy lipidowej w porównaniu z fazą wodną. Związki o większej rozpuszczalności w n-oktanolu niż w wodzie wykazują większą skłonność do akumulacji w tkance lipidowej organizmów wodnych. Wartość współczynnika podziału P_{OW} określa względne powinowactwo substancji do fazy organicznej (n-oktanolu) i wodnej. Wartości $P_{OW} > 1$ wskazują na większe powinowactwo substancji

do n-oktanolu, natomiast wartości P_{OW} < 1- do wody. Dla P_{OW} = 1 stężenia substancji w obu fazach są jednakowe.

Wartość log P_{OW} jest wykorzystywana do oceny lipofilowości substancji oraz do wstępnego szacowania jej potencjału do biokoncentracji i bioakumulacji. W uproszczonej ocenie przyjmuje się, że substancje o log P_{OW} < 3 wykazują na ogół mniejszy potencjał do bioakumulacji niż substancje o wyższych wartościach tego parametru. Nie jest to jednak uniwersalne kryterium, ponieważ rzeczywista bioakumulacja zależy również m.in. od trwałości substancji, jej metabolizmu oraz szybkości wydalania z organizmu. Tradycyjnie współczynnik podziału wyznacza się stosując ekstrakcję w układzie n-oktanol/woda (metoda wytrząsania w kolbie) bądź wyznacza się metodami pośrednimi, z użyciem wysokosprawnej chromatografii cieczowej (HPLC) lub metodami obliczeniowymi.

WYKONANIE ĆWICZENIA

Metodyka wyznaczania współczynnika podziału z zastosowaniem ekstrakcji w układzie n-oktanol/woda.

Aby wyznaczyć współczynnik podziału dla danego związku chemicznego, należy doprowadzić do stanu równowagi między składnikami układu oktanol/związek/woda po czym oznaczyć stężenia badanego związku w obydwu rozpuszczalnikach. Oznaczenie należy wykonać przez pobranie z naczynia badawczego próbki każdej fazy i oznaczenie substancji wybraną metodą, odpowiednią dla badanego związku.
W tym ćwiczeniu należy wykonać oznaczenie stężenia acetofenonu i trichloroetenu w fazie wodnej, stosując metodę spektrofotometryczną w oparciu o krzywą wzorcową. Stężenia tych związków w fazie organicznej należy obliczyć z bilansu masy substancji rozpuszczonej w fazie wodnej przed wytrząsaniem z cieczą organiczną ($V^{w\cdot}$ $c_i^{pocz.}$) oraz po ustaleniu się stanu równowagi, tzn.:

$$V^w c_i^w + V^{org} c_i^{org} = V^w c_i^{pocz} \quad (2)$$

gdzie V^w, V^{org} oznaczają odpowiednio objętości fazy wodnej i organicznej a c^w i c^{org} – stężenia molowe danej substancji w fazie wodnej i organicznej.

W celu zapewnienia dokładności wyznaczenia współczynnika podziału, badania należy powtarzać wykonując je w kilku różnych wariantach, stosując różne ilości badanej substancji i różne proporcje objętości rozpuszczalników.

Sprzęt i odczynniki

Spektrofotometr UV-Vis, kuwety kwarcowe.
Szkło laboratoryjne:
rozdzielacze o pojemności co najmniej 150 cm^3 – 12 sztuk (minimum)
kolby miarowe na 50,00 cm^3 – 30 sztuk,
mikropipety na 50 µl i 100 µl,
pipety: na 1 cm^3, 5 cm^3, 10 cm^3, 25 cm^3,
cylinder miarowy na 50,00 cm^3 - 4 sztuki,
zlewki o pojemności 50 cm^3 – 8 sztuk,
Rękawice ochronne jednorazowe.
Ręcznik papierowy.
Odczynniki:
oktanol
metanol do mycia kuwet,

roztwór acetofenonu o stężeniu 500 mg/dm^3 w wodzie,
roztwór Tri o stężeniu 1460 mg/dm^3 w 1% etanolu.

Wykonanie oznaczeń

1. *Przygotowanie roztworów do krzywych wzorcowych (kalibracyjnych)*

Sporządzić serię wodnych roztworów acetofenonu i Tri do wyznaczenia zależności absorbancji tych roztworów od stężenia badanego związku, korzystając z prawa Lamberta-Beera:

$$A = \varepsilon \cdot d \cdot c \qquad (3)$$

gdzie ε oznacza molowy współczynnik absorpcji [dm^3·mol^{-1}·cm^{-1}], d - długość drogi optycznej [cm], a c – stężenie substancji absorbującej [mol·dm^{-3}].

Przed rozpoczęciem przygotowywania roztworów obliczyć brakujące objętości roztworu podstawowego acetofenonu w Tabeli 1. oraz stężenia roztworów Tri w Tabeli 2.

1.1. Acetofenon

Przygotować sześć wodnych roztworów acetofenonu o różnych stężeniach w zakresie od 1,0 mg/dm^3 do 30,0 mg/dm^3 z roztworu podstawowego o stężeniu 500 mg/dm^3, zgodnie z danymi zamieszczonymi w Tabeli 1.

Tabela 1. Dane do krzywej kalibracyjnej dla acetofenonu

Nr próbki	Objętość roztworu (w cm^3) acetofenonu o stężeniu **500** mg/dm^3	Rozcieńczenie do objętości końcowej próbki [cm^3]	Stężenie acetofenon w otrzymanej próbce [mg/dm^3]	Zmierzona absorbancja
1		50,00	**1,0**	
2		50,00	**5,0**	
3		50,00	**10,0**	
4		50,00	**15,0**	
5		50,00	**20,0**	
6		50,00	**30,0**	

1.2. Trichloroeten (TRI)

Z roztworu podstawowego TRI o stężeniu 1460 mg/dm^3 w 1% etanolu przygotować pięć wodnych roztworów o stężeniach w zakresie od ok. 15 mg/dm^3 do ok. 300 mg/dm^3 zgodnie z danymi zestawionymi w Tabeli 2.

Tabela 2. Dane do krzywej kalibracyjnej dla trichloroetenu

Nr próbki	Objętość roztworu (w cm^3) Tri o stężeniu **1460** mg/dm^3	Rozcieńczenie do objętości końcowej próbki [cm^3]	Stężenie Tri w otrzymanej próbce [mg/dm^3]	Zmierzona absorbancja
1	**0,5**	50,00		
2	**1**	50,00		
3	**2**	50,00		
4	**5**	50,00		

5	**10**	50,00		

2. Pomiar absorbancji roztworów wzorcowych

Zmierzyć absorbancję roztworów acetofenonu przy długości fali **246 nm**, a absorbancję roztworów Tri - przy długości fali **230 nm**. Wszystkie pomiary wykonywać względem wody destylowanej. Wyniki pomiarów zanotować w Tabelach 1. i 2., odpowiednio.

UWAGA: Kuwety przed zmianą roztworu i po zakończeniu pomiarów należy myć wodą destylowaną i metanolem, a następnie wysuszyć strumieniem chłodnego powietrza.

ODPADY: Roztwory użyte do pomiarów i popłuczyny po myciu kuwet należy zlewać do przeznaczonych do tego celu pojemników (NIE wylewać ich do zlewu !)

3. Przygotowanie mieszanin do wyznaczenia współczynnika podziału

Dla każdego związku przygotować cztery mieszaniny ekstrakcyjne o różnych proporcjach faz, zgodnie z Tabelami 3. i 4.

Tabela 3. Dane dotyczące ekstrakcji acetofenonu

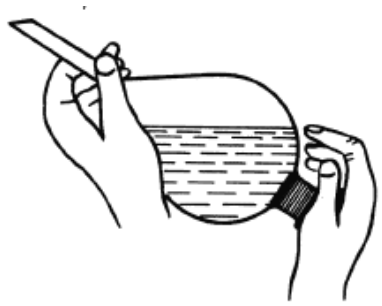
Objętość roztworu acetofenonu o stężeniu **500** mg/dm^3	Objętość oktanolu użytego do ekstrakcji [cm^3]	Absorbancja fazy wodnej po ekstrakcji	Stężenie w fazie wodnej po ekstrakcji, c^w [mg/dm^3]	Stężenie w oktanolu po ekstrakcji, c^{org} [mg/dm^3]	**Wartość $P=c^{org}/c^w$**
40,0 cm^3	20,0				
30,0 cm^3	25,0				
20,0 cm^3	30,0				
10,0 cm^3	35,0				

Tabela 4. Dane dotyczące ekstrakcji Tri

Objętość roztworu Tri o stężeniu **1460** [mg/dm^3]	objętość oktanolu użytego do ekstrakcji [cm^3]	Absorbancja fazy wodnej po ekstrakcji	Stężenie w fazie wodnej po ekstrakcji, c^w [mg/dm^3]	Stężenie w oktanolu po ekstrakcji, c^{org} [mg/dm^3]	**Wartość $P=c^{org}/c^w$**
95,0 cm^3	5,0				
90,0 cm^3	10,0				
85,0 cm^3	15,0				
75,0 cm^3	25,0				

W tym celu do czterech rozdzielaczy na 100 cm^3 należy przenieść odpowiednie ilości roztworów podstawowych acetofenonu lub Tri a następnie n-oktanolu (w takiej kolejności), zgodnie z danymi zawartymi w Tabelach 3. i 4. Rozdzielacze zamknąć szczelnie korkiem i wytrząsać delikatnie (patrz rys. 2.), odpowietrzając kilkakrotnie przez ostrożne, powolne przekręcanie kranika rozdzielacza. Kiedy ciśnieniew rozdzielaczu się ustali, można wytrząsać bardziej energicznie. Sposobem

zalecanym jest szybkie obracanie rozdzielacza o 180^0 wokół jego poprzecznej osi tak, aby powietrze nie przechodziło przez obydwie fazy.



Rysunek 2. Położenie rozdzielacza podczas wytrząsania.

Podczas wytrząsania, szczególnie w doświadczeniu z Tri, może powstać emulsja, co uniemożliwia dokładne rozdzielenie warstw. Aby temu zapobiec, należy na początku wykonywać ostrożny ruch wirowy lub kołowy rozdzielacza przy mieszaniu zawartości rozdzielacza i dopiero przy końcu ekstrakcji należy wstrząsać rozdzielaczem bardziej energicznie.

Zalecane jest wykonanie 100 obrotów w czasie ok. 5 minut.
Następnie rozdzielacze odstawić do statywu, aby ciecze się rozwarstwiły i sklarowały.
Po rozdzieleniu faz: górną warstwę stanowi roztwór badanego związku (acetofenonu lub Tri) w oktanolu, natomiast dolną – wodny roztwór tej substancji.

4. Oznaczenie stężenia badanego związku w fazie wodnej po ekstrakcji

Oznaczyć stężenie acetofenonu i Tri w wodnym roztworze po rozdzieleniu. W tym celu należy wyjąć korki z rozdzielaczy, podstawić pod rozdzielacze zlewki i wypuścić do zlewek około 10 cm^3 warstwy wodnej. Przed pobraniem próbki upewnić się, że fazy są całkowicie rozdzielone, a pobierana próbka nie zawiera kropli n-oktanolu. Ze zlewek pobrać próbki do pomiarów absorbancji. Uzyskane wyniki zanotować w Tabelach 3. i 4.

Opracowanie wyników

1. Korzystając z dowolnego programu komputerowego sporządzić osobne wykresy zależności absorbancji wodnych roztworów acetofenonu i Tri od ich stężenia (krzywe wzorcowe) i przybliżyć je linią prostą typu $\boldsymbol{y=a\cdot x}$ **(prosta ma przechodzić przez początek układu współrzędnych !**). Wyznaczyć współczynniki kierunkowe odpowiednich prostych oraz współczynniki determinacji R^2.

2. Na podstawie równań krzywych wzorcowych (kalibracyjnych), wyznaczyć stężenia acetofenonu i Tri w wodnych roztworach po wytrząsaniu z oktanolem. Wartości wpisać do Tabel 3. i 4.

3. Dla każdej mieszaniny obliczyć stężenia acetofenonu i Tri w rozpuszczalniku organicznym, korzystając ze wzoru (2). Wartości wpisać do Tabel 3. i 4.

4. Sporządzić wykres zależności c^{org}=f(c^w). Zależność aproksymować linią prostą przechodzącą przez początek układu współrzędnych. Współczynnik kierunkowy prostej (a) odpowiada wartości współczynnika podziału $\mathbf{P_{ow}}$ wyznaczonej graficznie.

5. Obliczyć współczynnik podziału n-oktanol/woda badanych związków dla poszczególnych mieszanin ekstrakcyjnych na podstawie danych zebranych w Tabelach 3. i 4. oraz wpisać te wartości w ostatniej kolumnie tych tabel. Przeprowadzić statystyczną ocenę otrzymanych wyników, obliczając średnią wartość, rozstęp i odchylenie standardowe pojedynczego wyniku.
Wyniki zestawić w Tabeli 5. (przygotowanej przez Studentów).

6. W celu dodatkowej oceny otrzymanych wyników, wykorzystać zależność, którą otrzymuje się przez podstawienie $c^{org} = P \cdot c^{w}$ do równania bilansowego (2), tzn.:

$$c^{pocz}/c^{w} = (V^{org}/V^{w})P + 1 \qquad (4)$$

Sporządzić odpowiednie wykresy zależności stosunku stężeń od stosunku objętości, zgodnie z równaniem (4), a następnie wyznaczyć współczynniki kierunkowe prostych przybliżających te zależności (równanie typu y=ax+1), czyli znaleźć wartości P_{OW} (wartość P wyznaczona graficznie z równania (4)).

7. Porównać wyniki, w postaci $\log P_{OW}$, wyznaczone graficznie (pkt 4. i 6.)

8. Wyszukać co najmniej jedną wartość literaturową (cytować pracę w sprawozdaniu) dla każdego badanego związku i porównać wyniki swoich oznaczeń z wartościami literaturowymi $\log P_{OW}$.

9. Na podstawie wartości $\log P_{OW}$, porównać lipofilowość acetofenonu i Tri oraz skomentować możliwe znaczenie tej właściwości dla ich zachowania w środowisku.

Sprawozdanie

Sprawozdanie powinno zawierać:
1. krótki opis zasady wyznaczania współczynnika podziału n-oktanol/woda oraz stosowanej metody oznaczania stężenia w fazie wodnej;
2. Tabele 1-4 uzupełnione wynikami pomiarów i obliczeń;
3. krzywe kalibracyjne acetofenonu i Tri wraz z równaniami prostych i wartościami R^2;
4. obliczenia c^w, c^{org}, P_{OW} i log P_{OW};
5. wyniki analizy statystycznej: średnią, rozstęp i odchylenie standardowe;
6. wykres $c^{org} = f(c^w)$ oraz wykres wynikający z równania bilansowego;
7. porównanie wartości P_{OW} otrzymanych różnymi sposobami;
8. porównanie wyników z danymi literaturowymi wraz z podaniem źródła;
9. wnioski obejmujące porównanie lipofilowości obu badanych związków i odniesienie do ich możliwego zachowania w środowisku.

Warunkiem zaliczenia ćwiczenia jest wykonanie oznaczeń, opracowanie wyników oraz terminowe oddanie sprawozdania.

LITERATURA

[1] Pigoń K., Ruziewicz Z., *Chemia fizyczna*, tom 1 wyd. 6, PWN, Warszawa 2007
[2] Starzyk E., Arct J., *Lipofilowość i absorpcja przeznaskórkowa w kosmetyce*, Wiadomości PTK, 6(3) 12-17, 2003
[3] Arct J., Chełkowska M., *Czy możliwe jest przewidywanie zdolności wnikania w skórę aktywnych składników produktów kosmetycznych?* Wiadomości PTK 4(3/4) 37- 42, 2001

Zakres zagadnień obowiązujących do ćwiczenia

1. Prawo podziału Nernsta i warunki jego stosowalności.
2. Współczynnik podziału *n*-oktanol/woda (P_{OW} oraz log P_{OW}) oraz jego praktyczne zastosowania.
3. Lipofilowość i znaczenie współczynnika podziału w opisie zachowania substancji chemicznych.
4. Bioakumulacja i jej związek z lipofilowością substancji.
5. Zasada ekstrakcji ciecz–ciecz i bilans masy w układzie dwufazowym.
6. Podstawy spektrofotometrii UV-Vis i prawo Lamberta–Beera.

7. Krzywa kalibracyjna: przygotowanie, równanie prostej i wykorzystanie do oznaczania stężenia.
8. Budowa i podstawowe elementy spektrofotometru UV-Vis.