## Vælg et eller to af miljøfremmede stoffer

Fra en af rapporterne

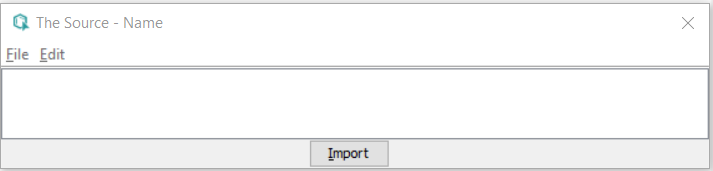
* ”Screening for humane lægemidler i vandmiljøet”
* ”Lægemiddelkortlægning på Sygehuse i Region Nordjylland” (Notat)
* ” Miljø- og energieffektiv rensning af miljøfremmede stoffer i særligt belastet spildevand”

Eller fra EU's overvågningsliste

* <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/DA/TXT/HTML/?uri=CELEX:32020D1161&from=EN>

Læs strukturen ind i Marvinsketch

Vælg ”Structure” i menuen og så vælge ”Name to structure” (man kan også taste ctrl+shift+n).



I vinduet skriver man navnet. Programmet taler engelsk - dvs. nogle navne kan være lidt anderledes end i listen. Man kan gætte på, at de måske skal have et ”e” på enden eller at æ ændres til e eller lignende. Man kan også prøve at finde det engelske navn ved at søge på WWW.

Hvis beregningerne nedenfor ikke virker, så vælg et nyt stof.

Tilføj H-atomer ved at vælge ”structure” ”Add” ”Explicit hydrogens”.

## Brug strukturformlen til at svare på spørgsmålene

1. tæl antallet af upolære bindinger.
2. tæl antallet af polære bindinger.

**Tommelfingerreglen** for opløselighed i vand siger, at hvis et stof har mere end tre C-atomer i hydrofobe bindinger (upolære) for hver hydrofil gruppe (polær) så vil stoffet ikke være opløseligt i vand.

1. Vil stoffet være opløseligt i vand ud fra tommelfingerreglen - brug 1) og 2) til at svare på spørgsmålet.

P er ligevægtskonstanten for fordelingen af stoffet mellem vand og octan-1-ol - det samme som KF for den ligevægt.

1. beregn logP: ”Calculations” ”Partitioning” ”logP”
2. passer værdien for logP med din forudsigelse i 3)?
3. beregn opløseligheden i vand ”Calculations” ”Solubility” ”Aqueous solubility”
4. passer det med svaret til spørgsmål 3)?
5. er opløseligheden i vand pH-afhængig?
6. hvis svaret er ja, hvordan kan det være?

Aktivt kul er meget små stykker carbon, der er behandlet så de har mange små porer i sig. Det betyder, at de har en stor overflade - flere hundrede kvadratmeter per gram! Fast carbon har to stabile former ved normale temperaturer og tryk: diamant og grafit (se evt. side 64 i Basiskemi C). I aktivt kul er det grafit. Grafit har en stor elektronsky på overfladen, så det danner gode Londonbindinger.

1. kan aktivt kul bruges til at fjerne de undersøgte stoffer fra spildevand?

Saml dine svar i skemaet nedenfor.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Stoffets danske navn | Engelsk navn, hvis det ikke er det samme | Antal upolære bindinger | Antal polære bindinger | Er stoffet mest polært eller upolært (vurdér ud fra bindingerne) |
|  |  |  |  |  |
|  | logP | Er stoffet overvejende i octan-1-ol eller i vand? | Passer det med vurderingen ud fra bindingerne? | Vil aktivt kul kunne fjerne stoffet? |
|  |  |  |  |  |
|  | Opløseligheden i vand | Er den afhængig af pH? | Hvordan kan det være? | Vil pH påvirke om aktivt kul kan bruges? |
|  |  |  |  |  |

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Stoffets danske navn | Engelsk navn, hvis det ikke er det samme | Antal upolære bindinger | Antal polære bindinger | Er stoffet mest polært eller upolært (vurdér ud fra bindingerne) |
|  |  |  |  |  |
|  | logP | Er stoffet overvejende i octan-1-ol eller i vand? | Passer det med vurderingen ud fra bindingerne? | Vil aktivt kul kunne fjerne stoffet? |
|  |  |  |  |  |
|  | Opløseligheden i vand | Er den afhængig af pH? | Hvordan kan det være? | Vil pH påvirke om aktivt kul kan bruges? |
|  |  |  |  |  |