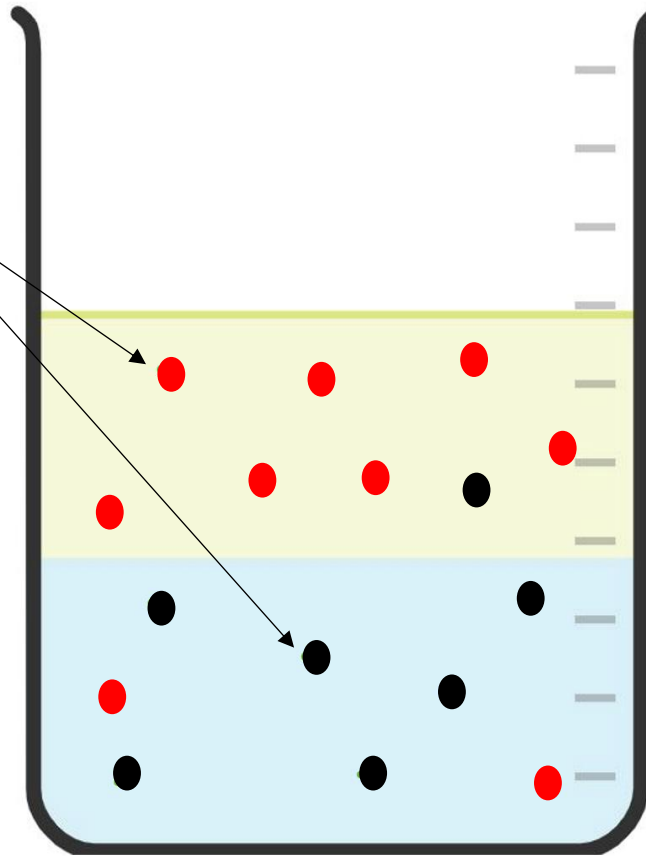


Löslighet i vatten och fett

De röda prickarna symboliserar ett lipofilt ämne och de svarta ett lipofobt ämne (även om lösta ämnen egentligen inte syns).

Oktanol →

Vatten →



Olika ämnes löslighet i det ”feta” ämnet oktanol (c_{oktanol}) brukar jämföras med dess löslighet i vatten (c_{vatten}).

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

Ett ämnes löslighet i fett är påverkar hur det fördelas mellan olika faser i naturen, vilket i sin tur påverkar hur lätt det bioackumuleras och hur lätt det sprids genom vattenvägar.

Lipofilt ämne
(fettälskande)



Lipofobt ämne
(fetthatande)



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. Då finns risk för bioackumulering.

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.

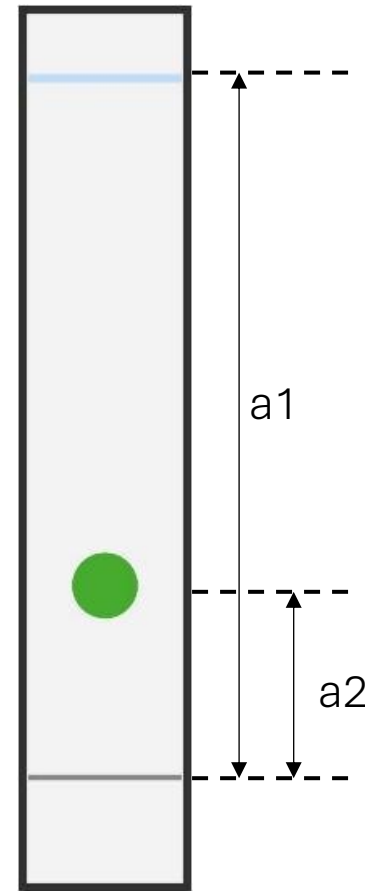
c = koncentration

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:

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



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

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)
www.su.se/kemilararnas-resurscentrum/