

1.GAIA: KARBONOAREN ZIKLOA

KARBONOA

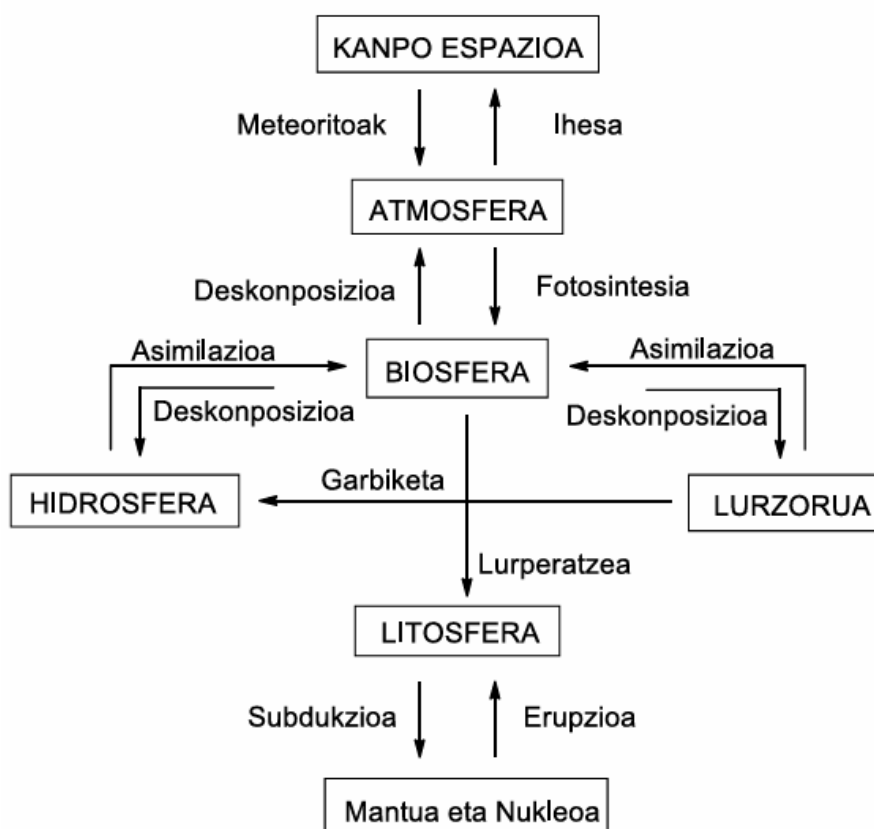
Bizitzaren forma guztietan ageri da: gluzidoak, lipidoak, proteinak eta azido nukleikoak...

Konposatu inorganikoetan ere bai: kareharria, dolomita (lurzoruan), HCO_3^- eta CO_3^{2-} (hidrosferan), CO_2 eta CH_4 (atmosfera).

Energia-iturriak (litosferan): petrolioak, ikatza

Forma alotropikoak: grafitoa, diamantea

ZIKLO BIO-GEO-KIMIKOAK

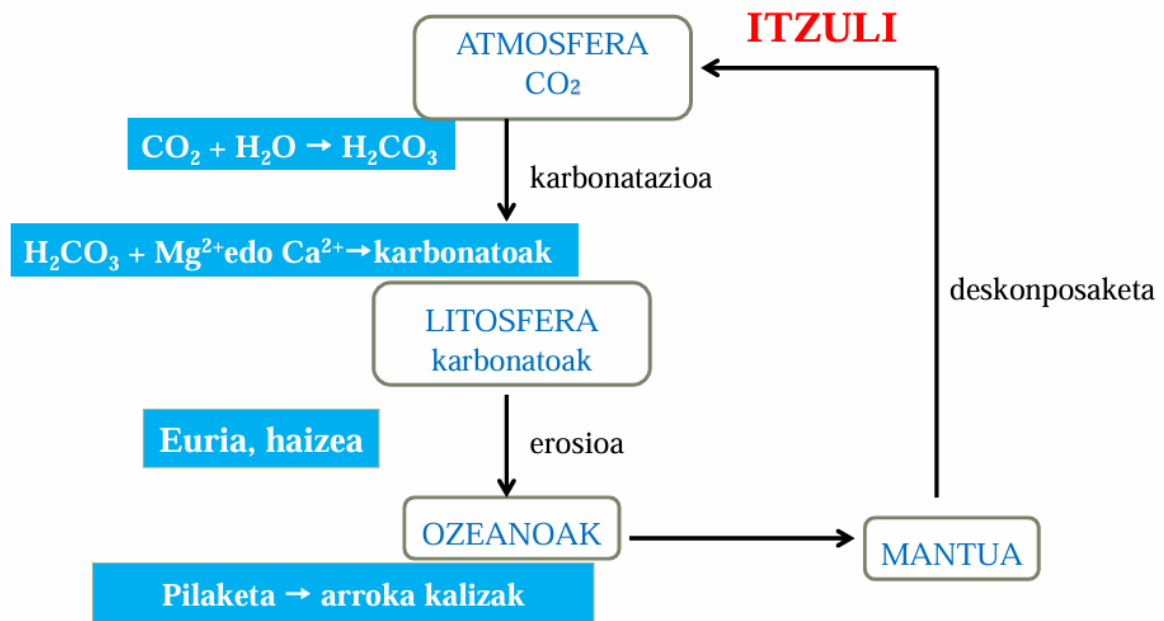


KARBONOAREN-ZIKLOA

KARBONOAREN ZIKLO GEOLOGIKOA

Hasiera: duela 4550·106 urte

Miloi urtetan zehar garatu da, miloi urtetako eskala



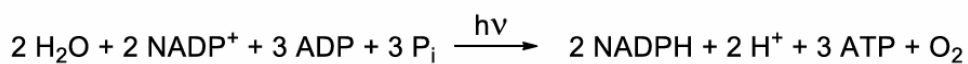
KARBONOAREN ZIKLO FISIKO-BIOLOGIKOA

Egun milaka urtetako eskala

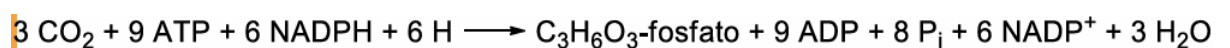
20 urtero berriztatzen da

Fotosintesia

- Fase argitsua

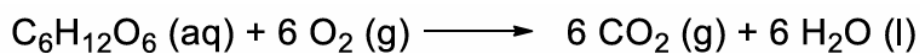


- Fase iluna edo Calvinen zikloa

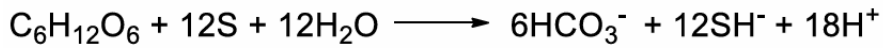
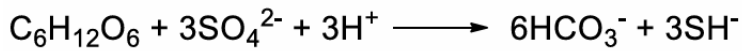
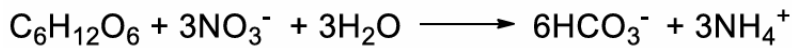


Arnasketa

- Aerobioa



- Anaerobioa



GIZAKIAREN ERAGINA KARBONOAREN ZIKLOAN

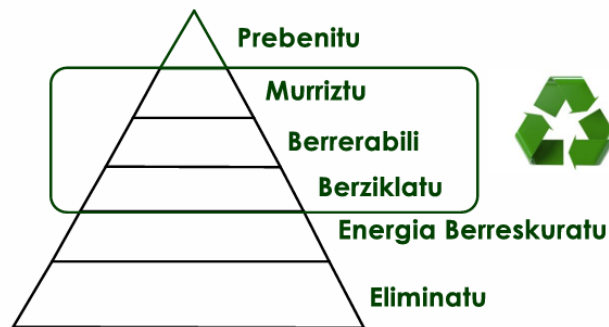
Deforestazioa



Negutegi efektua
Aldaketa klimatikoa

Hondakinak:
Biztanleria, industria,
garraioa, nekazaritza,
abeltzaintza,...

Hondakinak:



•Erabilitako materialak **MURRIZTU**
BERRERABILI
BIRZIKLATU

HONDAKINAK

Lehen sektoretik datozenak (nekazaritza, abeltzaintza, basogintza,...)

Bigarren eta hirugarren sektoreetatik datozenak (industrialak eta hirietakoak)

Hondakin batzuen birbalerizazioa

- nekazaritza, abeltzaintza, basogintzakoak (zurgintza)
 - Lekale-uzten hondarrak > ongarritze berdea (landare freskoa)
 - Lekale ez diren uzten hondarrak > deskonposatzean > humus > ongarri gisa

- Oilo-simaurra > konpostatzea, biogas ekoizkpena
- Minda > konpostatzea
- Basogintzako hondarrak > zerrautsa (ura xurgatzeko), pelletak,...
- Nekazaritzako elikagaien industria eta antzerakoak
 - Hiltegiak > ongarri
 - Kontserba-industria, ontziratze-industria, ehungintza, paper fabrikak > ongarri, bota, errautsi
 - Bestelakoak (azukre, ardo, fruitu lehor, kafe, olio eta halakoen ekoizpenaren hondakinak)
- Hirikoak
 - Hiriko hondakin solidoak > banatu, berrerabili, birziklatu, bota, errautsi
 - Araztegiatiko lohiak > ongarri

ARRISKUAK

- Metal astunak
- Substantzia toxikoak
- Mikroorganismo patogenoak
- Nutriente gehiegi edo gutxiegi
- Biodegradagarriak ez diren materialak
- Gazitasuna
- Beste batzuk

Karga kritikoa: zoru bati kalterik eragin gabe gehitu dakioken osagai baten kantitate maximoa

Irizpidea	Arrisku maila		
	Handia	Ertaina	Txikia
Toxizitatea (LD ₅₀ -ppm)	<200	200-1000	>1000
Iraunkortasuna zoruetan (hilabete)	>12	6-12	<6
Karga kritikoa zoruetan (mg Kg ⁻¹)	<0,2	0,2-0,5	>0,5
Mugikortasuna	handia	ertaina	txikia
Iraunkortasuna landareetan (hilabete)	>3	1-3	<1
Elikagaien kalitatean eragina	handia	ertaina	nulua

EKONOMIA LINEALA



EKONOMIA ZIRKULARRA

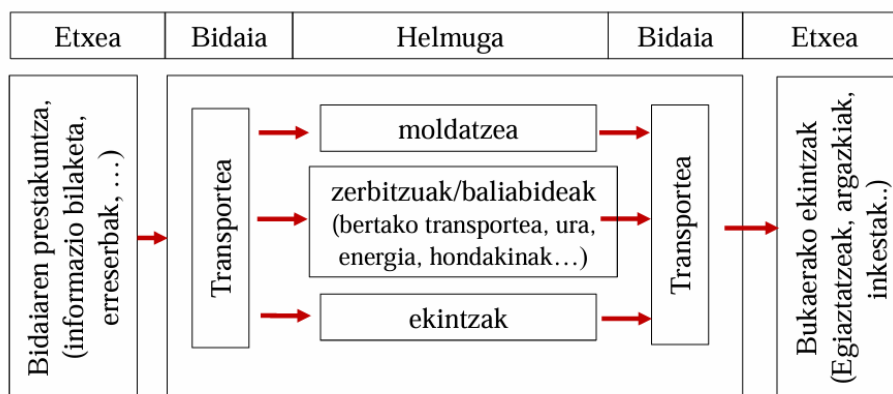
Ekonomia zirkularrak erabilera bultzen du eta ez kontsumoa. Hau da, ziklo bakoitzaren barruan elementuak erabili, berreskuratu edo zaharberritu egiten dira, sistema hau ekonomia industrial tradizionalak baino askoz eraginkorragoa da.



BIZITZA ZIKLOAREN ANALISIA

Edo bizitza zikloaren ebaluazioa (LCA, ingelesezko siglak, produktu, prozesu edo sistema batek, jatorritik bukaerara, ingurunean uzten duen azterna neurtzen duen prozesua da.

TURISMORA APLIKATUTAKO ADIBIDEA



Behin eraginak neurtuta, irtenbide jasangarriagoak bultzatzeko erabakiak hartu daitezke.

KIMIKA BERDEA

Kimika berdea (Green Chemistry) pasa den mendeko 90eko hamarkadan sortu zen asmo berri batekin: teknologia kimiko berritzaileak sortzea produktu kimikoen diseinu, fabrikazio eta maneian substantzia kimiko arriskutsuen erabilera eta sorrera murrizteko.

Beraz, Kimika Berdearen helburu nagusia da produkzio kimikoak eragiten dituen ingurumeneko arazoak txikitzea, ez sortutako kutsadura eliminatuz, baizik eta arazoari bere erroetatik aurre eginez: hondakinik sortzen ez duten prozesuak erabiliz.

Kimika berdearen 12 printzipioak Paul T. Anastasek y John C. Warnerek idatzi zituzten lehenengo aldiz bere Green Chemistry: Theory and Practice izeneko liburuan, 1998an argitaratua izan zena.

12 PRINTZIPIOAK:

1. Hondakinen eraketa saihestu
2. Ekonomia atomikoa
3. Sintesi kimiko seguruagoak (toxikotasuna)
4. Konposatu seguruagoak diseinatu (toxikotasuna)
5. Erreakzio-baldintza eta disolbatzaile seguruak erabili
6. Efizientzia energetikoa areagotu (erreakzioak inguru presio eta tenperaturan egin)
7. Lehengai berriztagarriak erabili
8. Deribatu kimikoak ekidin
9. Katalizatzaileak erabili
10. Produktu bio-degradagarriak diseinatu
11. Prozesu kimikoak bertan analizatu kutsadura ekiditeko
12. Istripu-arriskua murriztu (leherketak, suteak)

*

1. Hondakinen eraketa saihestu > E-faktorea

E-faktorea = hondakinen masa / lortutako produktuaren masa

Hondakinen masa = erreaktiboaren masa – lortutako produktuaren masa

2. Ekonomia atomikoa

%ekonomia atomikoa = (lortu nahi den produktuaren PM / erreaktiboaren PM batuketa)

*** 100**

2.GAIA: KIMIKA ORGANIKOAREN OINARRIZKO KONTZEPTUAK

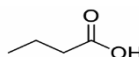
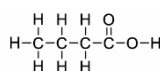
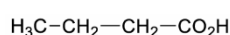
2.1: ISOMERIA

MOLEKULEN ADIERAZPENA:

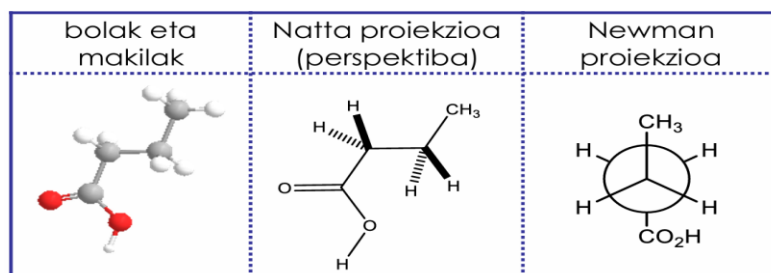
-formula trinkotua

-formula hedatua (Kekulé)

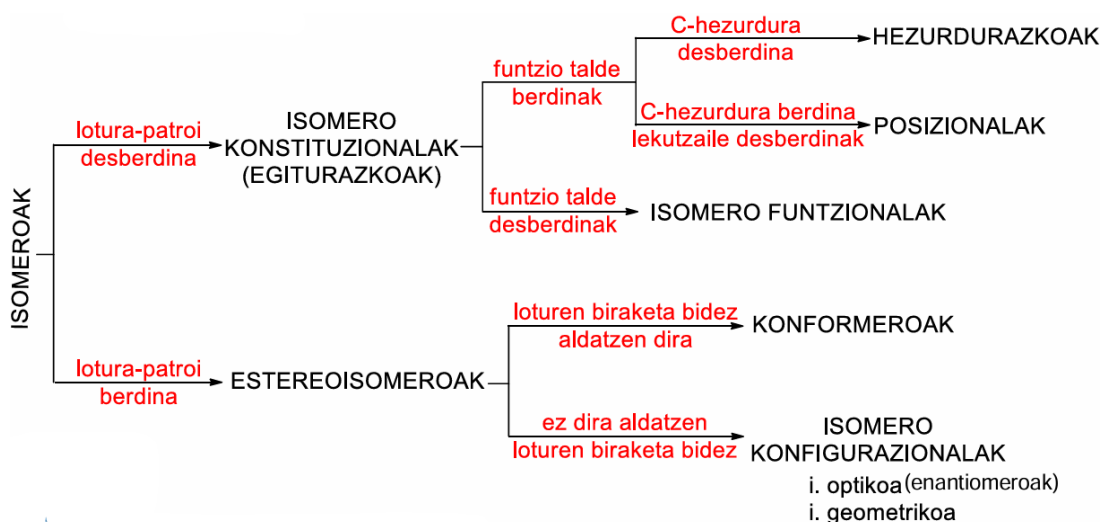
-lotura-lerroen formula (sigi-saga)



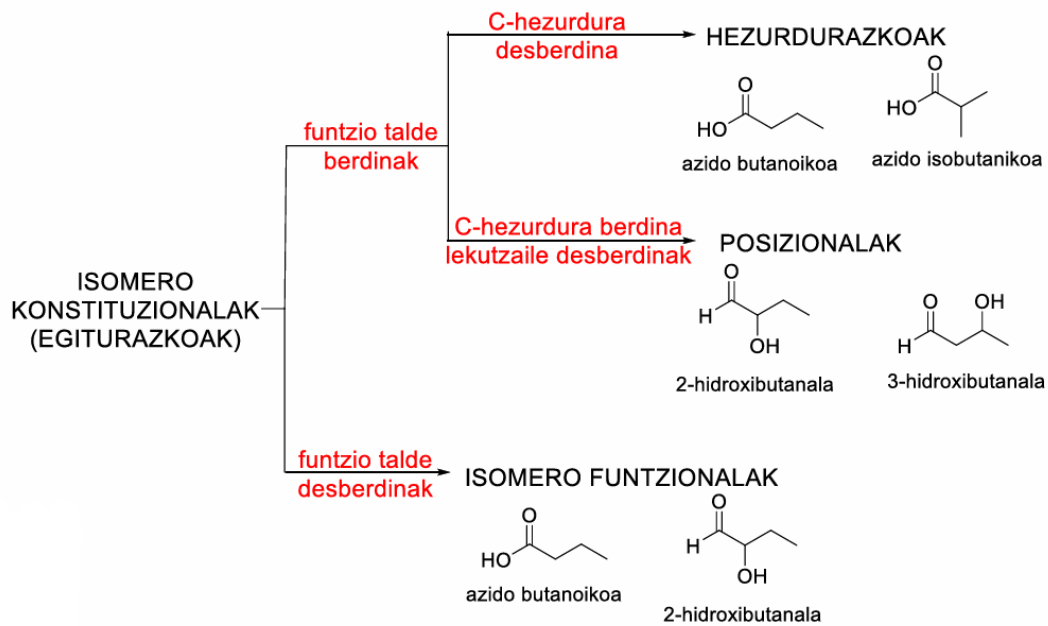
HIRU DIMENTSIOKO ADIERAZPENA



ISOMERO MOTAK

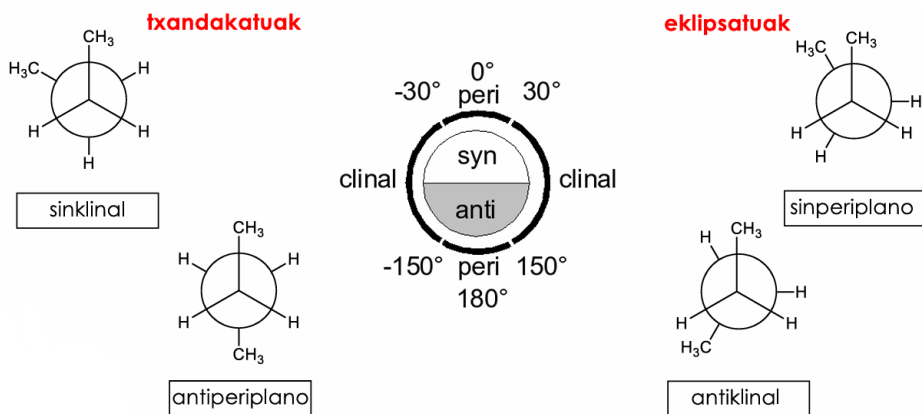


ISOMERIA KONSTITUZIONALA



ESTEREOISOMERIA

Lotura bakunek bere inguruan biratzeko gaitasuna dute → konformazioak. Ongi adierazteko: Newman

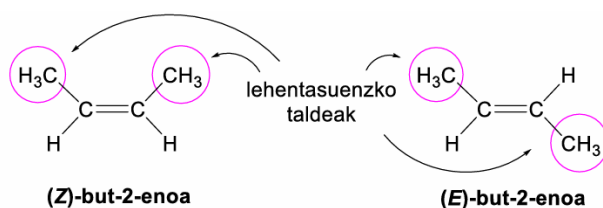


ISOMERIA GEOMETRIKOA

Alkenoak direnean, hau da, lotura bikoitza dagoenean, isomeria geometrikoa dago. Lotura bikoitza erditik moztu eta alde bakoitzeko lehentasunak begira zehazten da Z edo E konfigurazioa.

Z= alde berdinean, paralelo

E= kontrako aldean

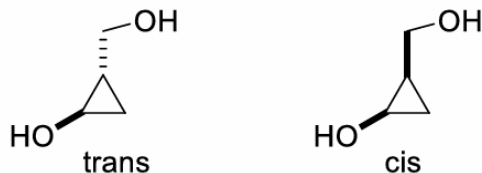


(lotura bikoitza lehen edo azkeneko karbonoan egon ezker ez da isomeria geometrikoa)

Zikoalkanoetan isometria geometrikoa beste bat da. Metilak ze aldetara doazen adierazten du honek. Cis edo trans izan daiteke.

Cis= alde berdiner

Trans= alde desberdiner



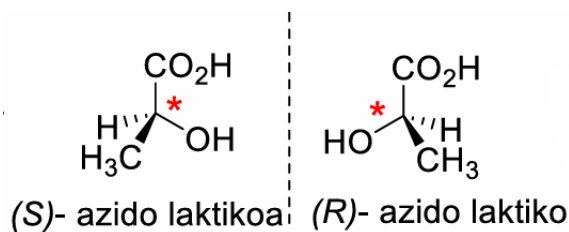
ISOMERIA OPTIKOA

C asimetrikoa: karbono asimetrikoa, karbonoak lau lotura direnean adierazten den asteriskoa da (*)

Honek ere konfigurazio bat du, S eta R.

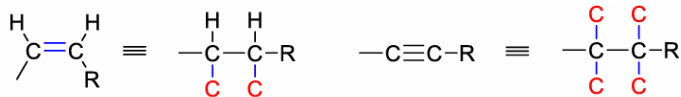
S= erlojuaren kontrako noranzkoan daude lehentasunak.

R= erlojuaren noranzkoan doaz.

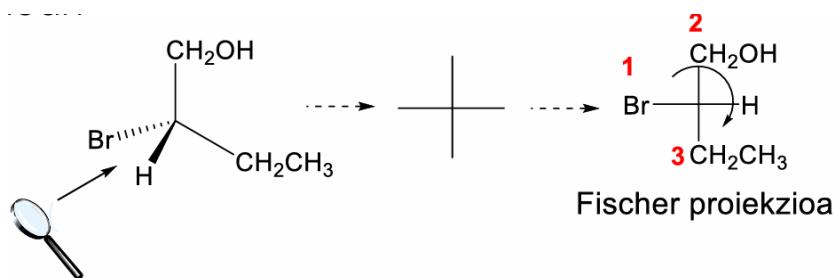


Konfigurazio hau zehazteko **arau** batzuk daude:

- araua:** zentro estereogenikoari (C asimetrikoari) lotuta dauden atomoak bere zenbaki atomikoaren hurrenkeran ordentzen dira: zenbaki atomiko handienetik txikienera.
I > Br > Cl > O > N > C > H
- araua:** bi atomo edo gehiago berdinak badira, zentro estereogenikotik urruntzen joango gara erabaki bat hartu ahal izan arte.
Et > Me; iPr > Pr
- araua:** lotura anizkoitzak bakunak balira bezala hartzen dira eta lotura horretako atomoak bikoiztu edo hirukoiztu egiten dira:



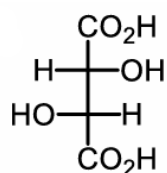
Fisher proiektzioa



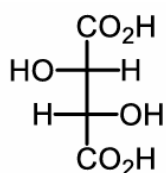
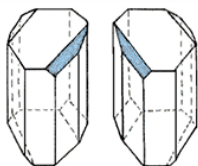
Pausuak:

1. Gurutze bat marraztu C asimetriko bakoitzerako
2. Planotik aurrera eta atzera dauden ordezkatzailleak horizontalean jarri
3. Planoan dauden ordezkatzailleak bertikalean jarri
4. Lehenetasunak eman CIP arauak jarraituz
5. Lehenetasun txikienerako ordezkatzaillea bertikalean badago irten zaigun konfigurazioa uzten da. Lehenetasun handienekotik txikienera joateko erlojuaren noranzkoan biratu behar bada R; aurkakoan biratu behar bada, S.
6. Lehenetasun txikienerako ordezkatzaillea horizontalean badago irten zaigunaren kontrako konfigurazioa jarri behar da. Lehenetasun handienekotik txikienera joateko erlojuaren noranzkoan biratu behar bada S; aurkakoan biratu behar bada, R.

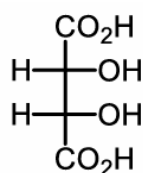
Bi zentro estereogeniko edo gehiago daudenean:



(2R, 3R)-(+)



(2S, 3S)-(-)



(2R, 3S)-meso

2.2 KONPOSATU ORGANIKOEN PROPIETATEAK

BRONSTED-LOWRI TEORIA

Azidoa: protoi bat (H^+) ematen duen substantzia da.

Basea: protoi bat jasotzen duen substantzia da.

Adibidea: $HCl + H_2O \rightarrow Cl^- + H_3O^+$
(HCl azidoa da; H_2O basea da)

LEWIS TEORIA

Azidoa: elektroi pare bat **onartzen** duen substantzia da.

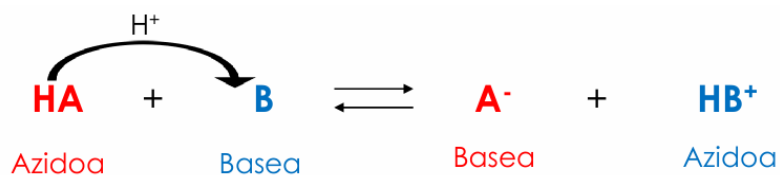
Basea: elektroi pare bat **ematen** duen substantzia da.

Adibidea: $BF_3 + NH_3 \rightarrow F_3B \leftarrow NH_3$
(BF_3 azidoa da; NH_3 basea da)

AZIDO BASE PARE KONJOKATUAK

Azido sendoa \rightarrow Base konjugatu ahula

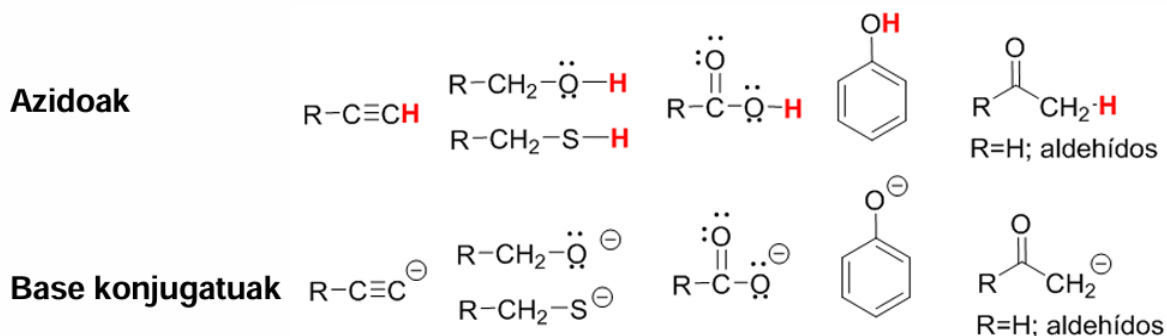
Azido ahula \rightarrow Base konjugatu sendoa



Azidoa **Base konjugatua**

HCl	Cl^-
H_2O	OH^-
NH_4^+	NH_3
HCO_3^-	CO_3^{2-}

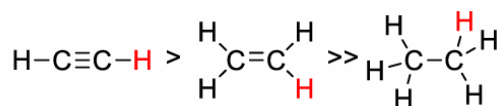
HIDROGENO AZIDOAK DITUZTEN KONPOSATUAK



Azidotasuna handituz doa H ari lotutako atomoaren elektronegativotasuna handitu ahala.

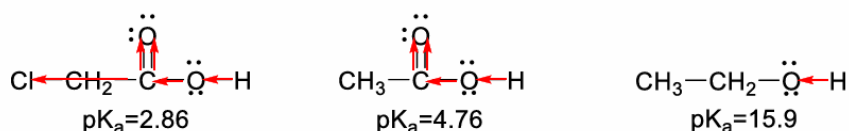
Loturaren garrantzitsua indarra da: ere lotura sendoagoa, azido ahulagoa.

H azidoari lotutako atomoaren hibridazioa: Zenbat eta s izaera handiagoa izan X-H lotura eratzen duen orbital hibridoak ($sp > sp^2 > sp^3$), orduan eta ahulagoa izango da X-H lotura eta ondorioz, H-a azidoagoa.

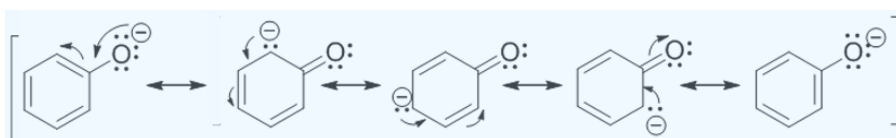


Azido baten sendotasuna bere base konjugatuaren egonkortasunak ere baldintzatzen du. Base konjugatua zenbat eta egonkorragoa izan, orduan eta sendoagoa izango da azidoa. Base konjugatuaren egonkortasuna efektu inductiboak eta erresonantziak baldintzatzen dute.

Efektu inductiboa: Handitu egiten da elektronegativitate balioa handitu ahala. Handitu egiten da atomo elektronegatiboen kopurua handitu ahala. Txikitu egiten da distantziarekin.



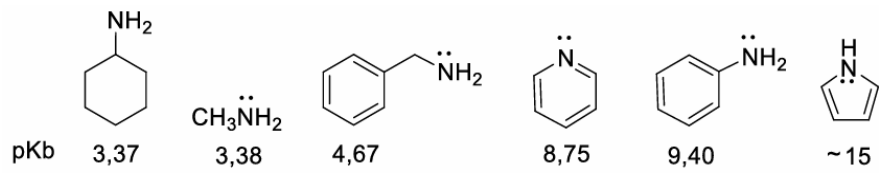
Erresonantzia: base konjugatua erresonantzia bidez egonkortu badaiteke, azidotasuna handitzen da.



BASIKOTASUNA

Dentsitate elektronikoa ematen duten taldeek amonio ioiaren egonatasuna handitzen dute, eta horrela aminen basikotasuna handitzen da

Hibridazioa: zenbat eta s izaera handiagoa izan, N-ren basikotasuna txikiagoa da.
Erresonantziak pare elektronikoa desleketzen bada, N-ren basikotasuna txikitzen da.



2.3 KONPOSATU ORGANIKOEN EMATEN DITUZTEN ERREAKZIOAK

LOTURA ETA MOLEKULA MOTAK

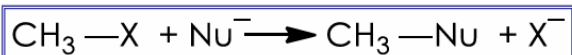
Molekula polarrak: asimetrikoak dira, gutxienez lotura kobalente polar bat dute eta beraien egituragatik momento dipolarrik ez dira anulatzen.

Molekula apolarrik: simetrikoak dira, ez dituzte elektroien bikote bakartiak, lotura kobalente polarrak izan ditzakete baina beraien egituragatik momento dipolarrik anulatu egiten dira.

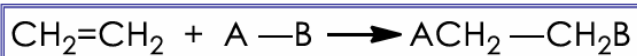
*Oinarrian molekula baten polaritatea honen arabera da: Hidrogeno loturak sortzeko duen ahalmen, atomo elektronegatiboen kopurua, lotura eta atomoen polarizagarritasuna, molekularen momento dipolarra.

ERREAKZIO MOTAK

ordezkapen erreakzioak, SE, SN



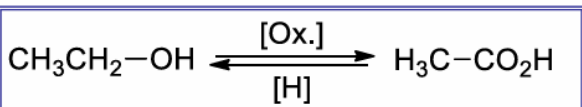
adizio erreakzioak, AE



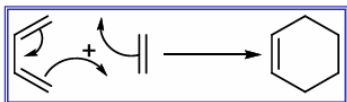
eliminazio erreakzioak



oxidazio-erredukzio erreakzioak



erreakzio periziklikoak (ingurumenean oso gutxitan ematen dira)



ERREAKZIO BATEN ABIADURA

erreaktiboen desagertze abiadura edo produktuen agertze abiadura da.

ERDIBIZITA t1/2

konposatu baten kontzentrazioa bere erdira jaisteko behar den denbora

ERREAKZIOBIDEA

erreaktiboez produktuak emateko bidean gertatzen den loturen apurketa eta sortze-prozesuaren pauso pausoko azalpen zehatza da. Eredu teorikoa da.

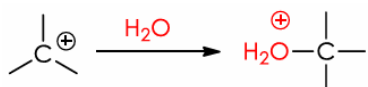
Nukleozaleak, Nu-:

elektroietan aberatsak diren espezieak dira. Lotura berriak era ditzakete elektroiei pare bat emanez



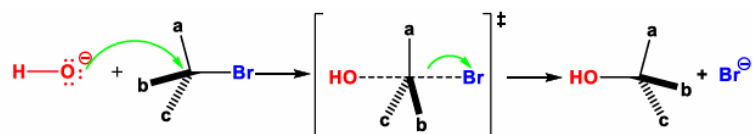
Elektroizaleak, E+:

Elektroietan urriak diren espezieak dira. Lotura berriak era ditzakete elektroiei pare bat onartuz



nukleozaleak	elektroizaleak
<input type="checkbox"/> R-OH	<input type="checkbox"/> H ⁺
<input type="checkbox"/> R-O ⁻	<input type="checkbox"/> NO ₂ ⁺
<input type="checkbox"/> H ₂ O	<input type="checkbox"/> NO ⁺
<input type="checkbox"/> R-NH ₂	<input type="checkbox"/> BF ₃ , AlCl ₃
<input type="checkbox"/> R-COO ⁻	<input type="checkbox"/> Katioi metalikoak: Na ⁺
<input type="checkbox"/> NH ₃	<input type="checkbox"/> R ₃ C ⁺
<input type="checkbox"/> OH ⁻	<input type="checkbox"/> SO ₃
<input type="checkbox"/> Halogenuroak	<input type="checkbox"/> CH ₃ Cl
	<input type="checkbox"/> halogenoak

SN2:



1.-Erreakzioaren abiadura Nu eta substratuaren kontzentrazioaren menpekoa da: nukleozale sendoek SN2-a errazten dute

2.-Nu-akkarbono asimetriko bat erasotzen badu, konfigurazioaren inbertsioa gertatzen da

3.-Erreakzioa azkarragoa da zenbat eta ordezkapen maila txikiagoa izan:

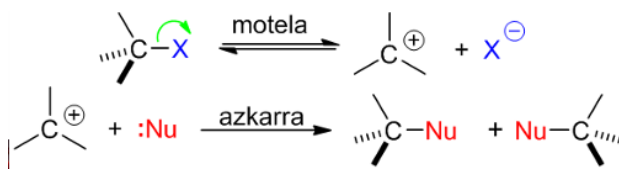


SN1

1.-Abiadura substratuaren menpekoa da soilik

2.-Nu-akC asimetriko bati erasotzen badio errazemizazioa gertatzen da

3.-Erreakzioa azkarragoa da zenbat eta alkilhalogenuro ordezkatuagoa izan: alkilhalogenuro $3^\circ > 2^\circ \gg 1^\circ$

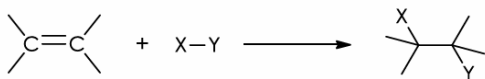


S_N1 , S_N2 , E1 eta E2 erreakzioen laburpena

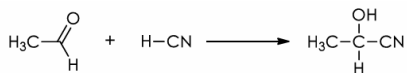
Metilo CH_3X	Alkilo 1° RCH_2X	Alkilo 2° R_2CHX	Alkilo 3° R_3CX
S_N2 erreakzioak ematen dituzte	Batez ere S_N2 erreakzioak ematen dituzte, eragozpen esteriko handiko base batekin izan ezik ($\text{CH}_3)_3\text{CO}^-$; bestela, E2 erreakzioak.	Batez ere S_N2 ematen dute base ahulekin (I^- , CN^- , RCO_2^-) eta batez ere E2 base sendoekin (RO^-). Temperatura igo ahala eliminazioa gehiago ematen da.	Ez dago S_N2 erreakziorik. Solbolisian S_N1 /E1 ematen dute, (tenperatura baxuetan S_N1). Base sendo bat (RO^-) erabiltzen bada, E2 ematen da gehienbat.

ADIZIO ERREAKZIOAK:

elektroizalea: erreaktibo elektroizaleak dentsitate elektroniko handiko eskualdeak bilatzen ditu



nukleoizalea: espezie nukleoizale batek dentsitate elektroniko baxuko eskualdeak bilatzen ditu



OXIDAZIO ERREAKZIOAK:

konbustioa: oxigenoarekin gertatzen diren oxidazio prozesu bortitzak; beroa eta argia igortzen dute.

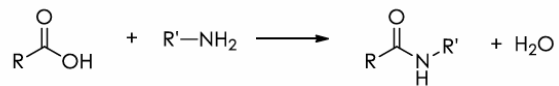
kate apurketa gabeko redox erreakzioak

KONDENTSAZIO ERREAKZIOAK

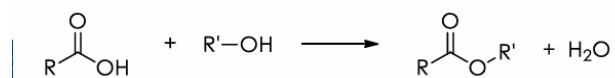
Bi molekula organiko elkartzen dira molekula txiki bat askatuz, gehienetan ura

Lehenengo adizio nukleozalea eta ondoren eliminazioa gertatzen dira

honela amidak era daitezke:



eta esterrak ere bai



3.GAIA: KONPOSATU ORGANIKOEN BILAKAERA INGURUMENEAN

SUBSTANTZIA ORGANIKOEN IBILERA INGURUMENEAN

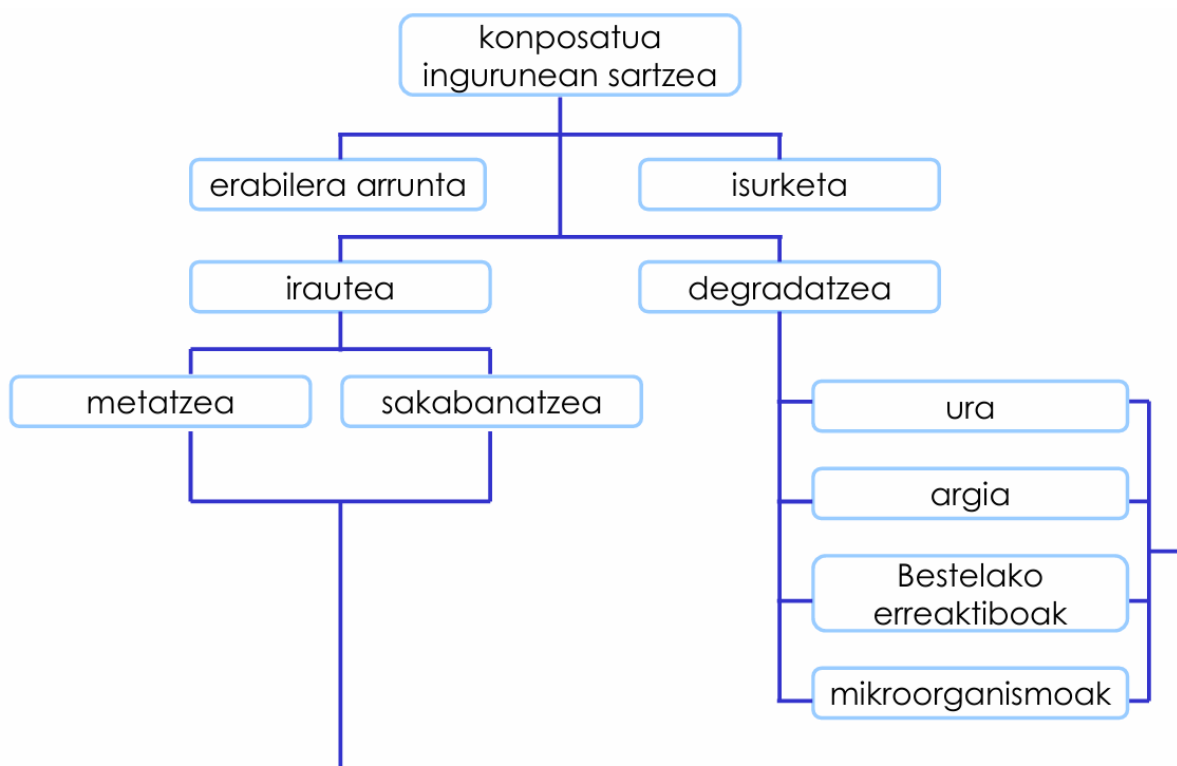
KONPOSATU BATEN BILAKAERA INGURUMENEAN

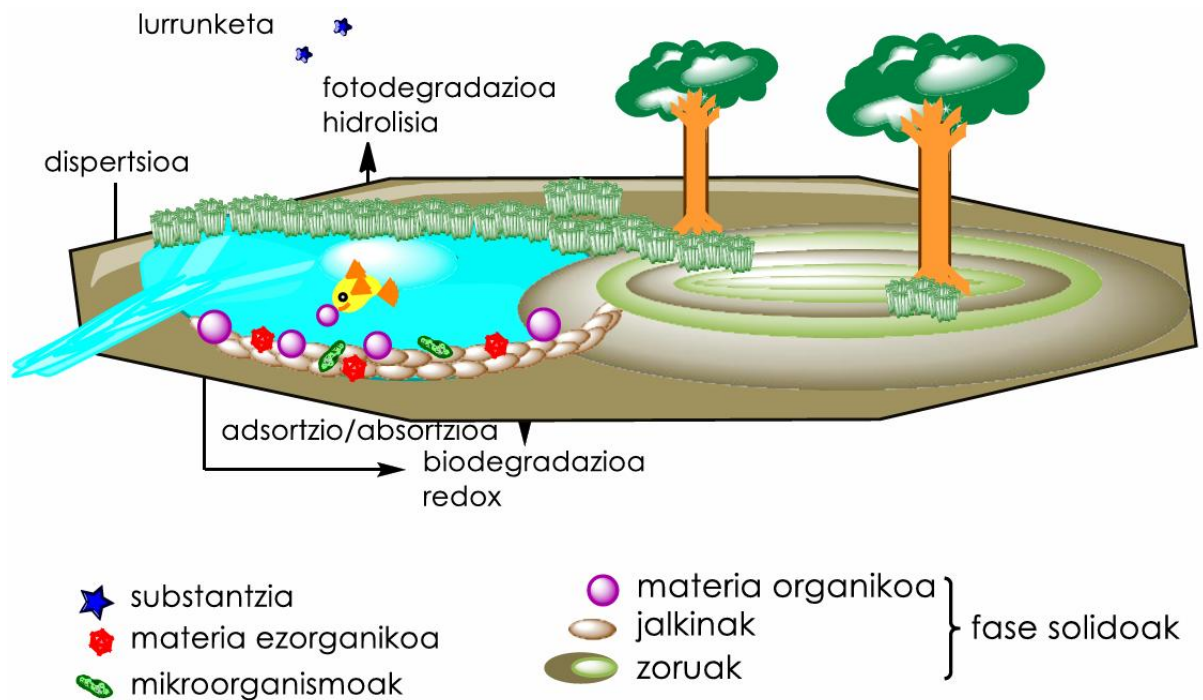
Garraio, difusio eta degradazio prozesuen konbinazioa.

- Disoluzioa-lurrunketa-banaketa faseen artean
- Erreakzio kimikoak, fotokimikoak eta biologikoak

Gogoan izan:

- Erreakzio baten abiadura
- Oreka kimikoa
- Katalisia eta katalizatzaileak
- Funtzio termodinamikoak





SUBSTANTZIEN GARRAIOA INGURUMENEAN

Aire-ur elkarrekintza. Lurrunketa

lurrazaletik troposferara lurrunduz, sustantzia bat ingurunean banatzeko bide eraginkorrena eta distantzia luzeetara.

Gasa bada, zuzenean isuria

Likidoa bada, lurrunduz; solidoa bada, sublimatuz: fase aldaketak energia behar du.

Lurrun presioa=gas fasean dauden molekulek likidoaren gainazalean egiten duten presioa. Tenperatuaren menpekoa.

Solidoen lurrun presioa txikiagoa izan ohi da eta ez dira oso hegazkorrak izaten.

*disolbagarritasunaren araberako taula:

S (mg/l)	Sailkapena ¹
<0,10	Solukaitza
0,1-1	Disolbagarritasun txikia
1-10	Disolbagarritasun ertaina
10-100	Erraz disolbatzen da
>100	Oso disolbagarria

-Substantzia atmosferara igarotzea substantzia horren lurrin presioak eta kontzentrazioak baldintzatuko dute.

Lurrin presioa=gas fasean dauden molekulek likidoaren gainazalean egiten duten presioa. Tenperatuaren menpekoa da. Lurrin presioa zenbat eta handiagoa, konposatua orduan eta hegazkorragoa izango da.

- Konposatu baten kontzentrazioaren eta lurrin presioaren arteko erlazioa Henry-ren legeak mugatzen du.

Henryren legearen arabera, tenperatura konstante mantenduta, likido batean disolbatutako gasaren kontzentrazioa gas horrek likidoari eragiten dion lurrin presioarekiko proportzionala da.

PRESIO UNITATEAK

1 Pa = 1 N/m² Nazioarteko Sistemaren unitatea³

- 1 Pa = 7.5 x 10⁻³ mm Hg (Torr)
- 1 kPa (kilopascal)= 1000 Pa= 7.5 mm Hg (Torr)
- 1 mPa(milipascal) = 0.001 Pa = 7.5 x 10⁻⁶ mm Hg (Torr)
- 1 atm = 101.325 kPa (kilopascal)
- 1 atm = 14.70 lb/pulg²

Lurrin presioa:

Konposatua	Pv (kPa) (atm)	Hegazkortasuna
Naftaleno	1,09 10 ⁻² (1,08 10 ⁻⁴)	>10 ⁻⁴ , handia
Azenafteno	5,96 10 ⁻⁴ (5,9 10 ⁻⁶)	
Fenantreno	2,67 10 ⁻⁵ (2,64 10 ⁻⁷)	
Antrazeno	1,44 10 ⁻⁶ (1,42 10 ⁻⁸)	10 ⁻⁴ -10 ⁻⁸ , ertaina
Fluoranteno	2,54 10 ⁻⁴ (2,51 10 ⁻⁶)	
Pireno	5,9 10 ⁻⁹ (5,8 10 ⁻¹¹)	<10 ⁻⁸ , txikia

HENRYREN LEGEA

P_i= i-ren lurrin-presioa disoluzioan (atm)

C_i= i-ren kontzentrazioa disoluzioan (mol/m³)

K_{Hi}= Henry ktea. (aire-ur(atm m³)/mol) banaketa ktea.)

$$K_{Hi} = \frac{P_i}{C_i}$$

* Henry konstantearen balio batzuk (T=298K)³

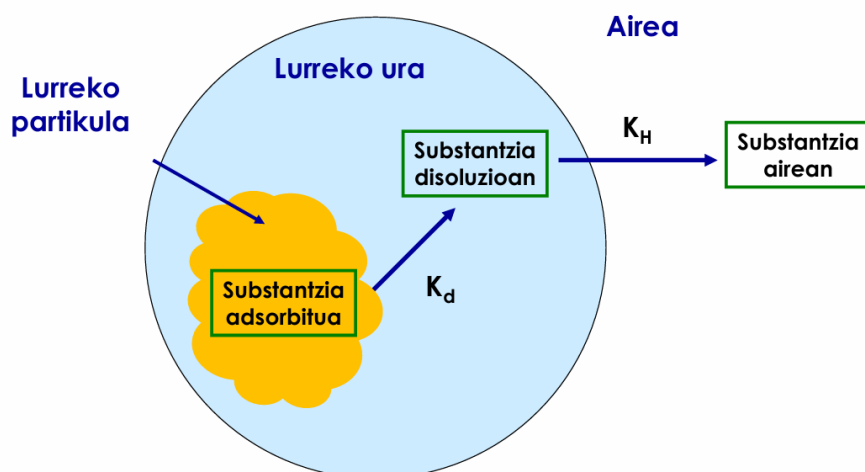
Hegazkortasuna		K _{Hl} balioak (atm m ³ /mol)
Ezer ez	Uretan disolbagarria	<3 x 10 ⁻⁷
Baxua		3 x 10 ⁻⁷ - 1 x 10 ⁻⁵
Ertaina	Lurrundu daiteke	1 x 10 ⁻⁵ - 1 x 10 ⁻³
Altua		> 1 x 10 ⁻³

CO₂

Beste gasekin kontrakoa gertatzen bada ere, uretan oso disolbagarria da, eta askoz ere disolbagarriagoa ur hotzean beroan baino.

Poloetako itsasoko uretan CO₂ proportzio handia dago disolbatuta.

CO₂ itsasoko uretan bikarbonato (HCO₃⁻) eta karbonato (CO₃²⁻) eran dago disolbatuta.



K_{oc}: karbono organikoaren adsortzio koefizientea (edo lurra/ura adsortzio koefizientea). Konposatu organiko batek lurrean edo sedimentuetan adsortzioa jasateko (bertan atxikia geratzeko) daukan joera neurtzeko balio du.

Zoru guztietan materia organikoa aurki daiteke eta askotan materia organiko hori da substantzia organikoak zoruetan lixibiatu gabe geratzearen erantzule. Efektu horren estimazioa K_{oc} lurreko materia organiko eta uraren arteko partizio koefizientearen bitartez egiten da.

$$K_{oc} = \frac{C_{\text{karbonoorganikoanitsatsia}} (\text{mg/g})}{C_{\text{ura}} (\text{mg/l})}$$

* Konposatuaren mugikortasunaren neurria Koc balioen arabera

Log K _{oc}	Mugikortasun maila	Adsortzio maila
<1	Oso altua	Oso baxua
1-2	Altua	Baxua
2-3	Neurritsua	Neurritsua
3-4	Ertaina-baxua	Ertaina-altua
4-5	Baxua	Altua
>5	Ez mugikorra	Oso altua

BIOAKUMULAZIOA

Organismo bizidun batek substantzia bat barneratzen du: airetik, uretatik, elikadurarekin

Metabolismoa eta irazketa / metatzea

n-oktanol-ura banaketa koefizientea, P edo K_{ow}: lipofiliaren neurria, zenbat eta handiagoa gehiago metatuko da gantz-ehunetan

$$P = K_{ow} = \frac{C_{n-oktanol}}{C_{ura}} \quad K_{ow} > 1000: \text{oso lipofiloa}$$

π renbalioekin estima daiteke.

$\pi = \log \frac{P_X}{P_H}$ ordezkatzailer lipofiloek $\pi > 0$ $\pi(\text{Cl}) = 0.71$ $\pi(\text{NH}_2) = -1.23$
 ordezkatzailer hidrofiloek $\pi < 0$ $\pi(\text{O}^-) = -3.87$ $\pi(\text{NO}_2) = -0.28$

* Hainbat ordezkatzaileraren π balioak

	-NH ₂	-OH	-CHO	-CN	-CO ₂ H	-NO ₂	CH ₃	-Cl	-C ₆ H ₅
π	-1.23	-0,67	-0,65	-0,57	-0,32	-0,28	0,56	0,71	1,96

* Substantzien bioakumulatzeko gaitasunaren neurria Kow balioen arabera

Log K _{ow}	Bioakumulatzeko gaitasuna	adibideak
>5	Oso handia	DDT, aldrin, klordano, mirex, bentzo[a]pireno
3,5-5	Handia	Antrazeno, 5Cl-BF
3-3,5	Ertaina	1,2-diklorobentzeno, xileno
1-3	Txikia	Lindano, diuron, 2,4-D, aspirina, valium
<1	Oso txikia	Azetona, binil azetatoa

* hainbat intsektizida halogenaturen, PHAren, PCBren eta dioxinen Kow balioak

Konposatua		log K _{ow}
DDT	← metatzea →	6,2
Nikotina	← banatzea →	1,3
Dieldrin		3,88
Lindano		2,67
PHA (hidrokarbuero aromatiko polinuklearrak)		3-6,9
Dioxinak eta PCBak (bifenilo polikloratuak)		4-8

Biokontzentrazio faktorea, FBC (sustantzia baten kontzentrazioa organismo batean/kontzentrazioa ingurunean).

$$FBC = \frac{C_{\text{organismoan}}}{C_{\text{ingurunean}}}$$

Adb:

$$FBC = \frac{C_{\text{arrainean}}}{C_{\text{uretan}}}$$

TOXIZITATEA

- **Toxikologia:** organismo bizidunengan substantzia arrotzek duten efektu kaltegarrien azterketa da.
- **Epidemiologia:** taldeen arteko historialen azterketaren bidez gaixotasunen eta ingurumeneko baldintzen arteko erlazioa zehaztea du helburu.
- **Toxizitate akutua:** substantzia baten dosi bat hartu ostean berehala ematen den sintomen agerpena.
- **Toxizitate kronikoa:** epe luzean zehar airean, uretan edo elikagaietan dagoen substantzia baten dosi txikien esposizioaren ondorioz gertatzen den sintomen agerpena.
- Toxizitatea LD50 balioen bidez eman ohi da: laginaren subjektuen 50%-entzat hilgarria den substantzia kantitatea, gehienetan mg/kg-tan adierazia. Egitura-aktibitate erlazio kuantitatiboen bidez estima daiteke
- Substantzien toxizitatea dosi-erantzun kurben bidez konparatzen da.
- Substantziak zein mota toxikologikotan sailkatzen diren jakiteko bere DL50 balioa jakin behar da.

* Substantzien toxizitate motak DL50 balioen arabera

DL ₅₀ gorputz-masaren mg/kg-tan	Sailkapena (toxizitatea)	Mota toxikologikoa	Adibideak
<5,0	Muturrekoa	I	Paration
5,0-50,0	Altua	II	Dieldrin
50,0-500,0	Neurritsua	III	Piretrinak
>500,0	Arina	IV	Malation

IRAUNKORTASUNA

*Substantzien iraunkortasun maila $t_{1/2}$ ren arabera

$t_{1/2}$	Iraunkortasuna ³
<4 aste	Arina
4-26 aste	Txikia
27-52 aste	Neurritsua
1-20 urte	Handia
>20 urte	Iraunkorra

GUS indizea (Groundwater Ubiquity Score)

GUS (Groundwater Ubiquity Score) indizea erabiltzen da pestizida batek lurrazpiko urak kutsatzeko duen gaitasuna estimatzeko. Bere erdibizitza denbora laburra eta K_{oc} altua badira, GUS balio txikiagoa izango du erdibizitza luzea eta K_{oc} txikiak dituenaren aldean.

$$GUS = \log t_{1/2} \cdot (4 - \log K_{oc})$$

$$K_{oc} [=] Lkg^{-1}; t_{1/2} [=] \text{egun}$$

GUS > 2,8: lixibiakorra

GUS < 1,8: ez lixibiakorra

1,8 < GUS < 2,8: tartekoa

* pestizida batzuen propietateak eta GUS indizeak

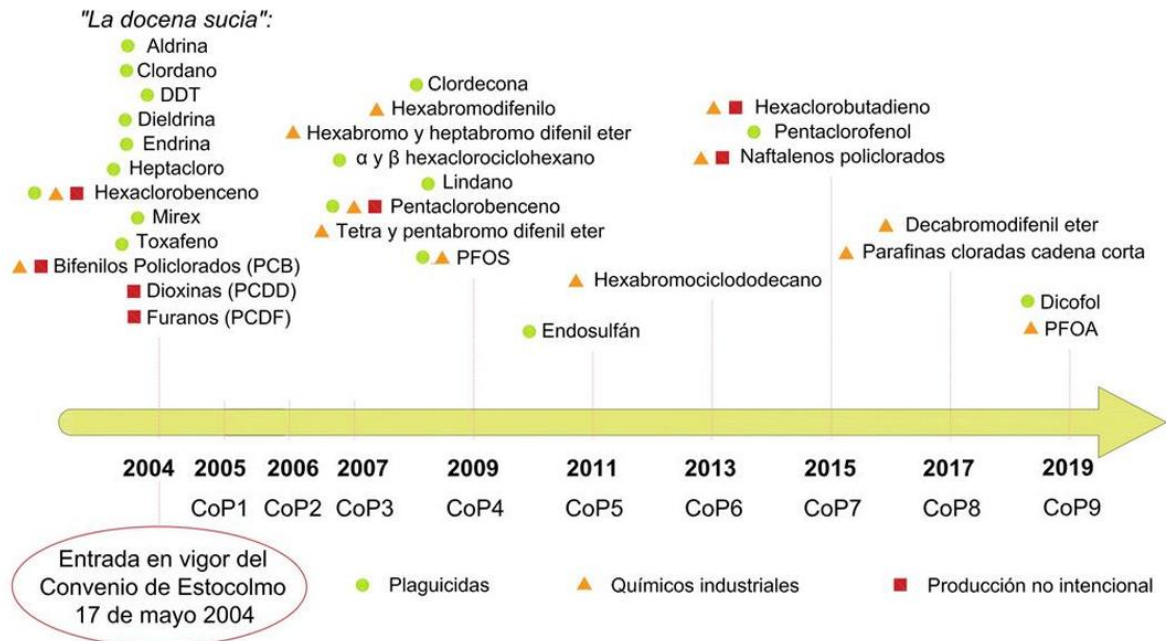
Konposatua	$t_{1/2}$ (zoruetan, egun)	K_{oc}	S (mg/l)	GUS balioa
Atrazina	60	100	33	3,68
Simazina	60	130	6,2	3,34
Lindano	400	1100	6,1	2,47
Klorpirofos	30	6070	0,4	0,37
Aldrin	100	2290807	0,02	-2,8

Kutsatzaile Organiko Iraunkorrak (KOI, COP)

Hauek dira konposatu organiko bat iraunkorra den edo ez definitzeko erabiltzen diren irizpideak:

- Muga-arteko garraioa pairatzeko gaitasuna:** $P_v < 1000$ Pa eta atmosferako erdibizitza-denbora > 2 egun edo urruneko tokietan detektatua izana.
- Toxizitatea:** Gizakion osasuna edo ingurumena kaltetzeko gaitasuna.

3. **Iraunkortasuna:** Erdibizitza denbora hauek baino handiagoa: hidrosferan, bi hilabete; zoru edo jalkinetan sei hilabete. Edo arazoak eragiteko nahikoa luzea dela kontsideratzen bada.
4. **Bio-metaketa:** Log Kow>5



KONPOSATU ORGANIKOEN BILAKAERA KIMIKOA INGURUMENEAN

1.UR INGURUNeko PROZESUAK

Erreaktiborik ugariena: H₂O

Konposatu organikoa + ura : *Hidrolisia*

Mekanismoak:

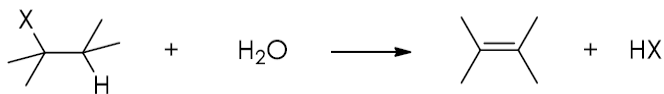
- Ordezkapen nukleozalea:



- Adizio-eliminazioa:



- Eliminazioa:

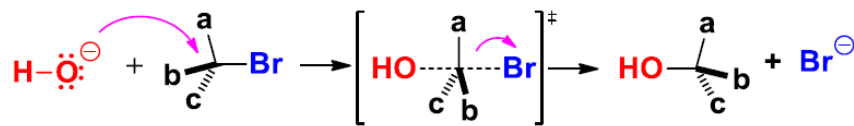


DERIBATU HALOGENATU ALIFATIKOAK

Ura nukleozalea da **deribatu halogenatu alifatikoen** aurrean

- Konposatu halogenatu deribatuak: uretan ohiko kutsatzaile toxiko eta iraunkorrak dira azaleko uretan eta lurrazpiko uretan.
- Erabilpena: disolbatzaileak, beste produktuak sintetizatzeko lehengaiak, anestesikoak, freoiak: CFC, HCFC, HFC, pestizidak (DDT), herbizidak, ...
- halogenoa uraz ordezkatuz: **alkohola**
- ordezkapen nukleozale erreakzioa: OH nukleozalea
- halogenoari lotutako C-a, elektroizalea
- Bi erreakziobide aukeran: SN2 eta SN1

SN2: Ordezkapen nukleozale bimolekularra da.



- Erreakzio-abiadura:

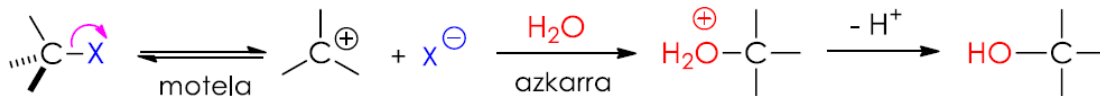
$$-\frac{d[RX]}{dt} = k_{H_2O}[H_2O][RX]$$

- Ur ingurunean:

$$k_{hidrol} = k_{H_2O}[H_2O] \Rightarrow -\frac{d[RX]}{dt} = k_{hidrol}[RX]$$

- Erreakzio-abiadura baldintzatzen duten faktoreak: Esteriko eta elektronikoak C-n, X talde ateragarria.

SN1: Ordezkapen nukleozale unimolekularra.



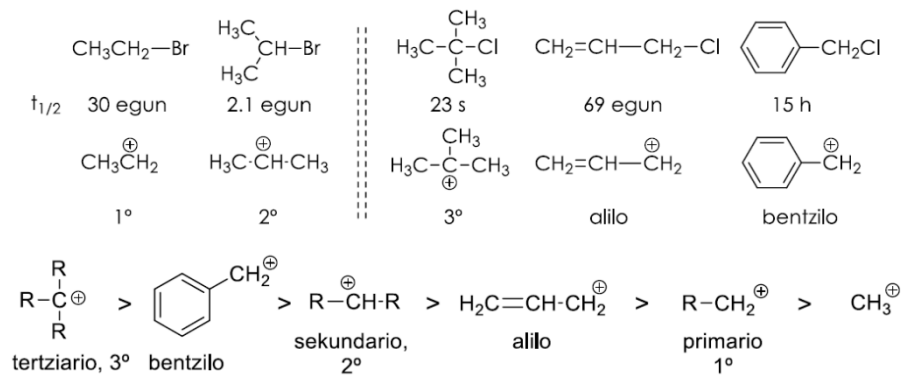
- Erreakzio-abiadura baldintzatzen duten faktoreak:
 - C-X loturaren indarra:

$$-\frac{d[RX]}{dt} = k_{hidrol}[RX] \quad t_{1/2} \quad \begin{array}{ccc} CH_3F & CH_3Cl & CH_3Br \\ 30 \text{ urte} & 340 \text{ egun} & 20 \text{ egun} \end{array}$$

- Faktore esterikoak:

	CH ₃ Cl	CH ₂ Cl ₂	CHCl ₃
t _{1/2}	340 egun	704 urte	3500 urte

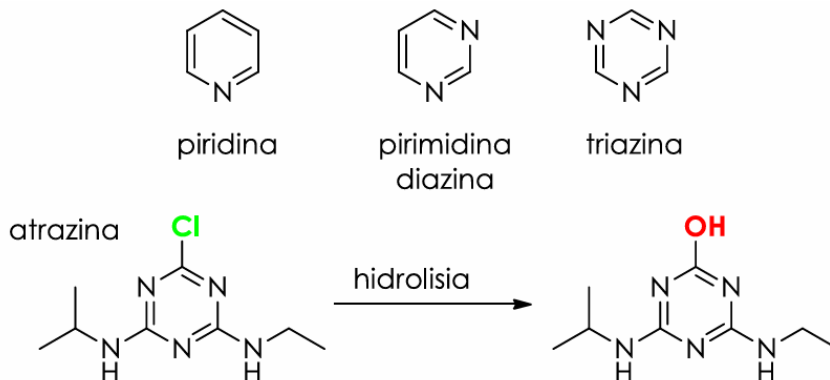
- Karbokatioiaren egonkortasuna:



DERIBATU HALOGENATU AROMATIKOAK

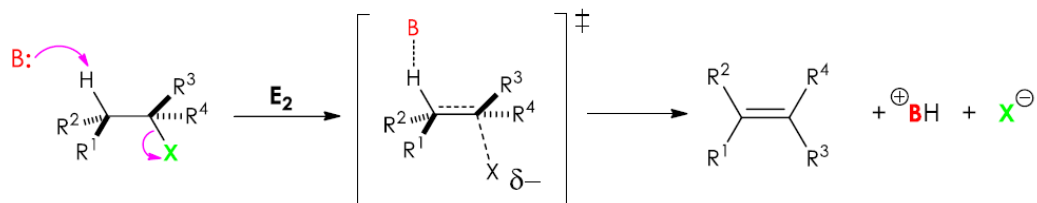
Erreakziobidea desberdina da

Eraztun heteroaromatiko nitrogenatuak bai, hidrolizatzen dira. adibidea: atrazinak (herbizidak)



POLIHALOGENATUAK

- ordezkapen nukleozalea motelagoa
- deshidrohalogenazio erreakzioa (eliminazioa)

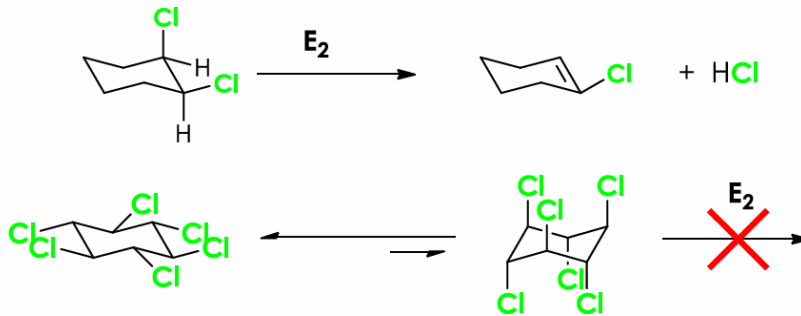


- inguruko pHa handituz bizkortzen da

- Erreakziobide konbinatuak

$$-\frac{d[RX]}{dt} = k_{H_2O}[H_2O][RX] + k_{OH^-}[OH^-][RX]$$

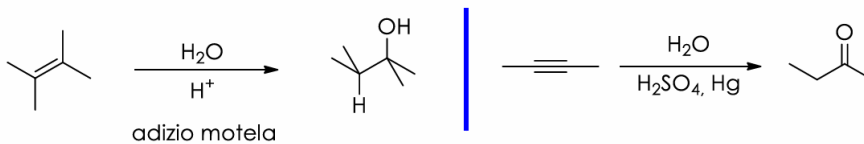
- H eta X antiperiplano posizioetan egon behar dira
- konposatu polihalogenatu ziklikoak:



- lindanoa oso iraunkorra da

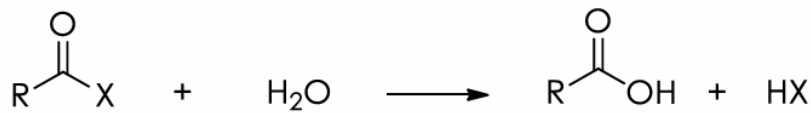
ALKENO ETA ALKINOEN HIDRATAZIOA: Adizioa

Inguru azidoan ematen da, katalisia behar du.

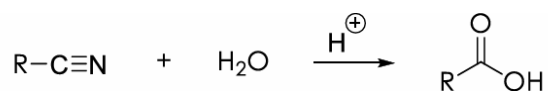


AZIDO KARBOXILIKOEN DERIBATUEN HIDROLISIA

amidak << esterrak < azil haluroak, anhidridoak

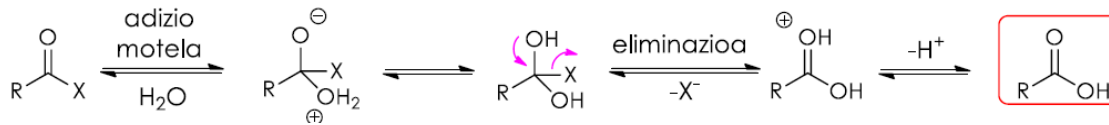


Nitriloak

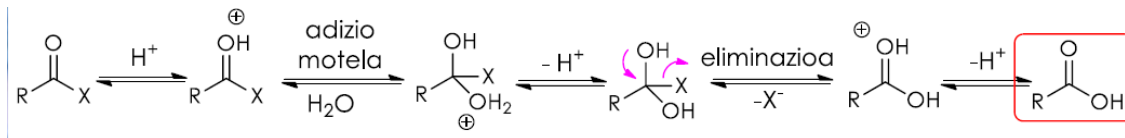


AZIDO KARBOXILIKOEN SORKUNTZA

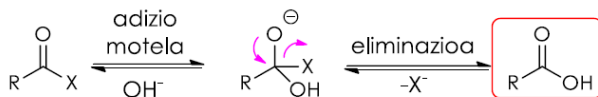
Ur inguru neutroan:



Ur inguru azidoan: Azidoak katalizatua

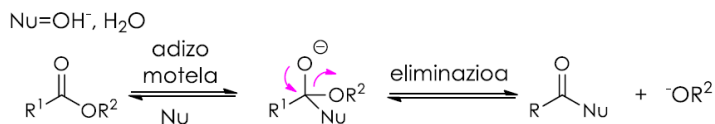


Ur inguru basikoan: Baseak katalizatua

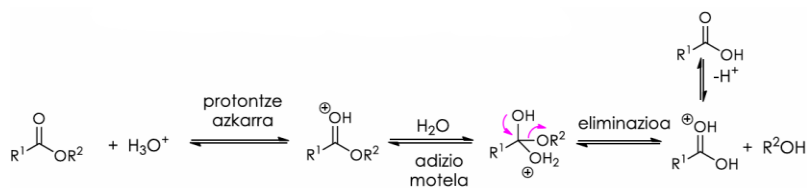


ESTERREN HIDROLISIA (Pestizidak, plastifikanteak...)

- Inguruko pH
- Esterraren egitura

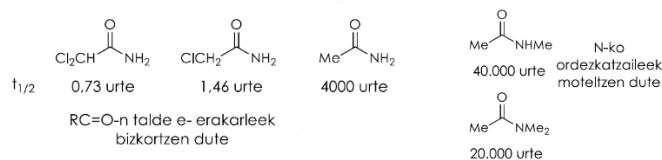


- Talde ateragarri onak eta R1-en talde elektrofilo erakarleak izanez gero, erreakzio-abiadura bizkortzen da.



AMIDEN HIDROLISIA

- Herbiziden kasuan garrantzitsua
- Erdi-bizitza denbora oso luzea.

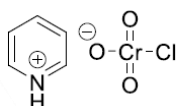


2.OXIDAZIOAK ETA ERREDUKZIOAK INGURUMENEAN

- **ERREDUKZIOA:** - irabazi/ H irabazi.
 - Ingurune erreduktoreak: Sulfuro, sulfato, burdina(II) karbonato eta hidrogeno sulfuroetan aberatsak diren inguruneak.
 - Ur sakonak, jalkinak, lohi anoxikoak → Adsortzioak erredukzioa gutxituko du.
- **OXIDAZIOA:** -galdu/ H galdu.
 - Mikroorganismoak parte hartu dezakete edo ez.
 - Espezie oxidatzaileak ingurumenean: O₂, Fe₂O₃, Mn₂O₃, MnO₂.
 - Espezie oxidatzaileak laborategian:
 - Alkoholak, az.karboxilikoak edo zetonara:
 - CrO₃, H⁺, H₂O (Jones erreaktiboa)
 - KMnO₄, H⁺, H₂O
 - K₂Cr₂O₇, H⁺, H₂O

- Alkohol primarioak aldehidora:

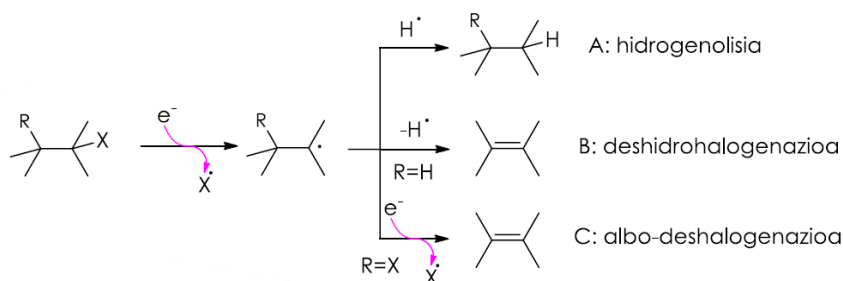
PCC: Piridinio klorokromatoa



- Mikroorganismoek parte hartzen dute
 - Prozesu abiotiko gutxi (metabolikoki eraginkorrek diren organismoen parte hartzerik gabe)
- Argia ere parte hartzen du → molekula organikoak argiarekin erreakzionatuko du.

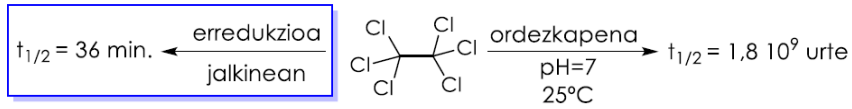
HALOGENATUAK

Deshalogenazio erreduktorea inguru anaerobioetan.

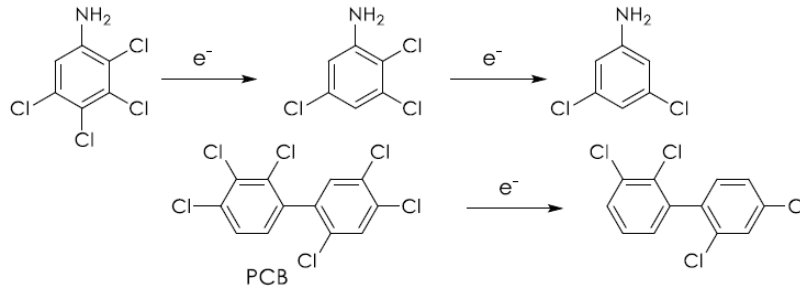


- Erreaktibitatea baldintzatzen dute:
 - halogenoak eta halogeno atomo kopuruak
 - C X loturaren indarrak

- Bitarteko erradikalaren egonkortasunak
- Hidrolisia baino eraginkorragoa

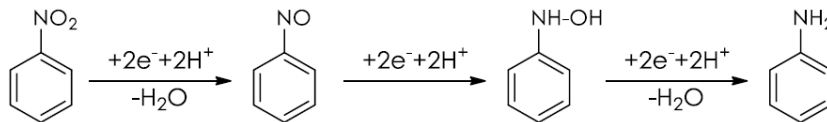


- Halogenatu aromatikoak: Hidrogenolisia
- Aromatiko polihalogenatuak: Ondoz-ondoko hidrogenolisiak (Adibidez PCB)



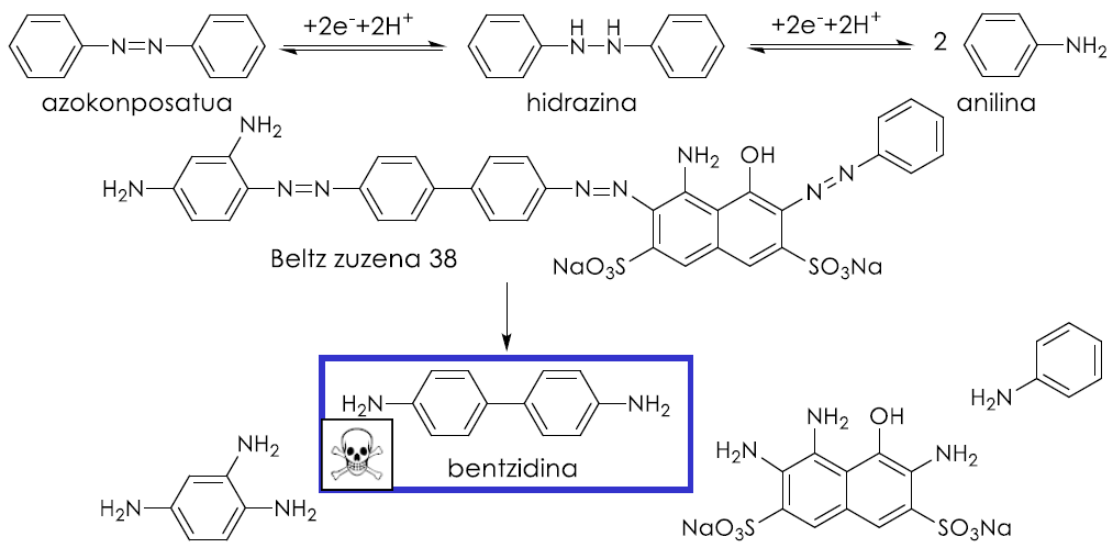
NITROKONPOSATUEN ERREDUKZIOA

- Aromatikoetan oso eraginkorra.
 - Nitro-nitroso
 - Nitroso-hidroxilamina
 - Hidroxilamina-amina
- Anilinak → toxikoagoak eta iraunkorragoak.



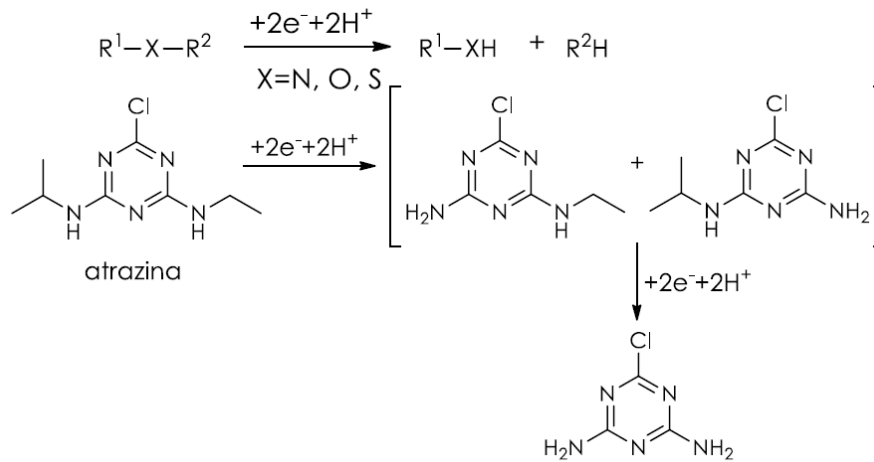
AZODERIBATU AROMATIKOEN ERREDUKZIOA

- Azoderibatua-hidrazina
- Hidrazina-anilina



DESALKILAZIO ERREDUKTOREA

- R baten ordez H bat.
- Produktuak antzeko egitura, baina propietate (disolbagarritasuna...)



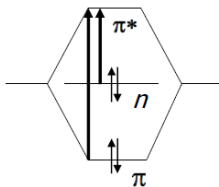
3.FOTO-DEGRADAZIOA

FOTODEGRADAZIOA: Konpos. organiko batek argiaren xurgapen zuzenarengatik, argizatutako ingurune batean jasaten duen eraldakuntza. Hau da, material baten aldaketa ematen denean argiarengatik.

- Lurrera iristen den eguzki argiaren espektroa 280-800 uhin luzera dauka. Eta uhin-luzeraren arabera 2tan sailkatu dezakegu:
 - Ultramoreak: 280-400 nm
 - Ikusgaia: 400-780 nm
- Irradiazio zuzeneko fotodegradazioa
- Baldintzak:
 - K.Organikoak KROMOFOROAK dituzte → Koloreaz arduratzen den molekularen zatia. C=C; C=O: elektroiz ez lotzaileak CX_n
- Erradiazio kantitatea baldintzatzen dute: Altitudeak, urte-sasoia, egunaren ordua...
- Hidrokarburo aromatiko poliziklikoen foto irradiazioak toxizitatea eragoten du eta ADN-a kaltetu dezake.

$$E = h\nu = h\frac{c}{\lambda}$$

E= energia (J fotoi⁻¹)
 c=2.9979 10⁸ m s⁻¹
 ν= frekuentzia (s⁻¹)
 h=6.6256 10³⁴ J s fotoi⁻¹
 λ= uhin-luzera (m) 2.8-8 10⁻⁷ m



$$A(\lambda) = \varepsilon(\lambda)CL$$

4.BIODEGRADAZIO PROZESUAK

- Substantzia bat, izaki bizidunen ekintza dela medio, deskonposatzeko prozesua. Honakoentzimek katalizatua:
 - bakterioak
 - onddoak
 - legamiak
 - algak
- ERREKALTZITRANTE/ BIOERREFRAKTARIO: Biodegradazioari aurre egiten dioten substantziak dira.
- BIOERREMEDIATZE: Ingurumeneko hondakinak degradatzeko mikroorganismoak erabiltzen direnean.
- FITORREMEDIATZE: Zoru eta jalkinen deskontaminaziorako landaredia erabiltzen denean.
- Jalkinetan errazago ematen da

- Gertatzen diren prozesuak → Deshalogenazio erreduktorea edo erredukzio anaerobioa, Oxidazio aerobikoa eta Hidrolisia.
- Hidrokarburo aromatiko poliziklikoak (PAH) ezabatzeko garrantzi handikoa da:
 - Exxon Valdez petroliuntziaren isurketa garbitzeko (Alaska, 1989) teknika hau erabili zen.

4.GAIA: PETROLIOAREN ETA BERE DERIBATUEN KIMIKA

4.1 PETROLIOA ETA BERE DERIBATUAK

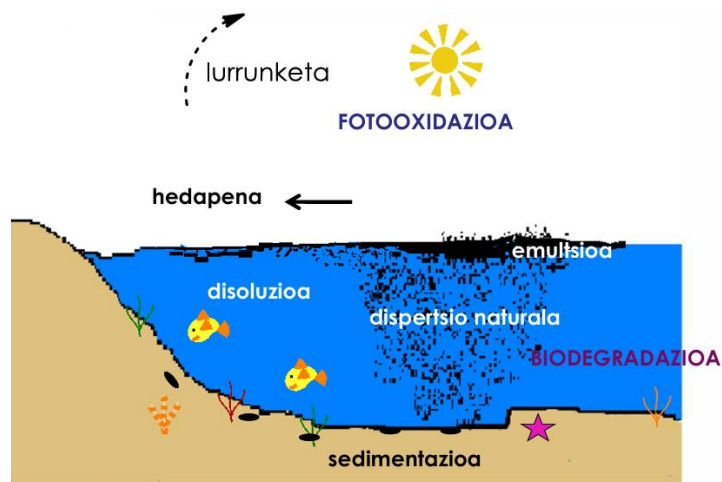
4.1.1 SARRERA

Hainbat konposatu organiko fosilen nahastea da. Petrolioaren egitura kimikoa luzera ezberdineko hidrokarburo katez osatua dago. Horien formula orokorra C_nH_{2n+2} da eta jatorriaren arabera proportzio aldakorrean aurkitzen dira. Uretan ez da ia batere disolbatzen. Petrolio gordin edo gordinki izenez ere ezagutzen da.

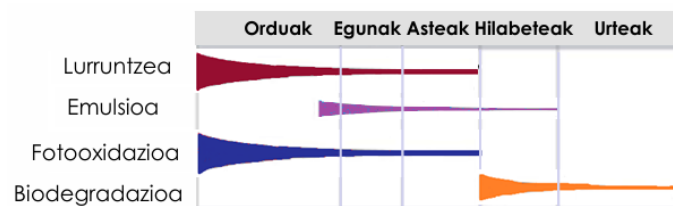
Petrolio motak: Brent, WTI (West Texas Intermediate, OPEP, Dubaiko petrolio...

4.1.2 PETROLEO-ISURKETA INGURUNEAN

Petrolio-isurketa ingurumenean baten bilakaera naturala:



Petrolio-isurketa baten bilakaera denboran zehar:



Petrolio isurketa bat gertatzen denean:

- Azalean geruza mehe bat eratzen da: argiaren transmisioa gutxitzen da (fotosintesian eragina) eta oxigenoaren difusioa murrizten (ura baino arinagoa).
- Bere degradaziorako oxigenoa behar da: uretako oxigeno-kontzentrazioa murriztu.
- Osagaiak toxikoak izan daitezke landareentzat (alga eta likenak asfixiatu) eta animalientzat (arrain eta hegazti itsastarretatik hasi eta gizakietaraino, kate trofikoetan zehar)
- Uraren propietate organoleptikoetan eragina du: usaina eta zaporea batik bat.

Petrolio isurketa bat dagoenean gertatzen diren prozesuak:

-Hedapena

- Indar hidrostatikoen eta gainazal tentsioaren eraginez petrolioak 0,1 mmko geruza mehe bat eratzen du.
- Petrolio orbanaren mugimendua ur-korronteen eta haizearen menpekua da.
- Petrolio arina azkarrago hedatzen da.

-Lurrunketa



- Osagai arinenak lurruntzen dira(C1-C8).
- 20-50% tartean lurruntzen da: osagaien kontzentrazioaren eta bere lurrin presioaren menpekua da (Henryren legea)
- Uraren tenperaturak, orbanaren hedadurak, haizearen abiadurak eta uraren agitazioak ere eragina dute.

-Dispersio naturala

- Petrolio tanta txikiak eratzen dira (0,01-1 mmko diametro tartekoak), urarekin nahasten dira eta gero eraldatzen dira.
- Uraren agitazioak areagotzen du.

-Disoluzioa

- 1% baino gutxiago disolbatzen da

Osagaia	Disolbagarritasuna uretan	
	g/m ³	Mol/m ³
CH ₃ (CH ₂) ₄ CH ₃	9,5	0,11
$\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{CH}(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	13,8	0,16
	55	0,65
	1780	22,8

-Emultsioa

Sistema koloidal bat beste batean dispersatuta

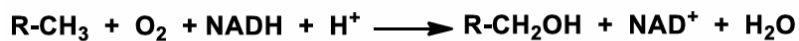
- Ura petrolioan
- Petrolio uretan

-Sedimentazioa

- Lurruntzen den zatia eta disolbatzen dena desagertzean zati astunena hondoratu eta sedimentatzen da.

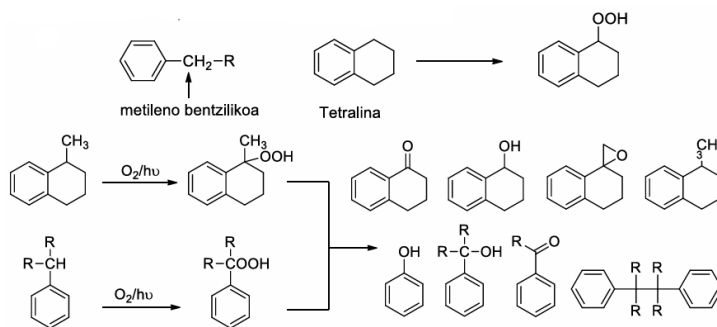
-Biodegradazioa

- Prozesu motela: isurketa gertatu eta astebete beranduago hasten da
- Disolbatuta edo dispersatuta dauden molekuletan gertatzen da.
- Alkano linealak errazago degradatzen dira.



-Foto-oxidazioa

- Argiaren eraginez hasten den oxidazioa (UV)
- Uraren gainazalean eta lurrundutako osagaietan garrantzia du.
- Eguzkiaren argiak O₂ molekularren presentzian gordinkiaren molekuletan funtzio talde oxigenatuak (alkohol, aldehido, zetona, azido karboxiliko, peroxido) sartzen dizkie



ESTRATEGIAK

a) Isurketaren eustea

- Barrera fisikoak

- Barrera kimikoak

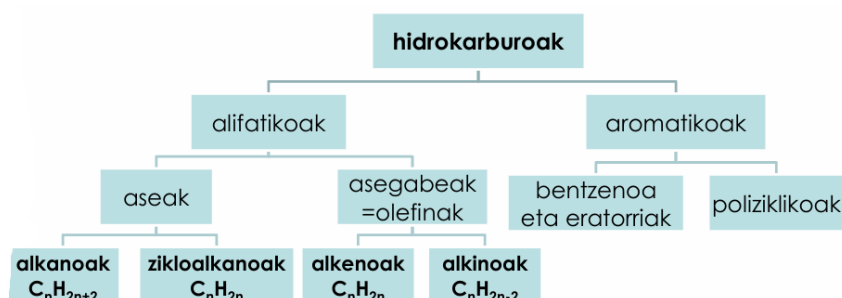
b) Garbiketa eta kentzea

- Kobustioa



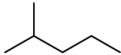
- Metodo mekanikoak
- Dispersante/emulsiongile/gogorgarriak
- Bioerremediazioa

4.1.3 PETROLEOAREN IZAERA KIMIKOA

a) Hidrokarburoak

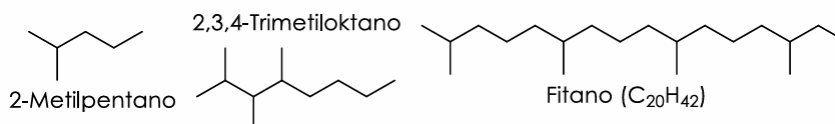


- **Dentsitatea:** k. organiko guztietan arinenak ($d < 1 \text{ g/ml}$)
- **Disolbagarritasuna:** uretan ez (ez-polarrak)
- **Irakite puntua:** PM bereko besteena baino baxuagoa
 - PM handitzean $20\text{-}30^\circ\text{C}$ igo karbono atomo bakoitzeko)
 - Adarkatze maila handitzean jaitsi: alkanoen molekulen arteko indarrak van der Waals indarrak dira eta ukipen-gainazalaren menpekoak. Gainazala handitu ahala, indarra handitzen da eta beraz, irakite puntua igotzen da.

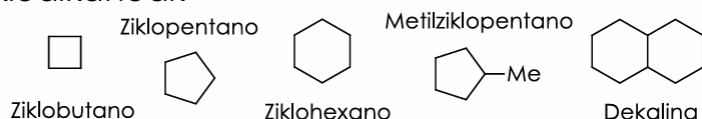
Izena	Formula	I. p. ($^\circ\text{C}$)
Pentano	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	36
2-metilbutano (isopentano)		28
2,2-dimetilpropano (neopentano)		10
hexano	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	69
isohexano		60,3

i. alkano linealak	egitura	i.p.°C (f.p.)
Butano (g)	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	-0,5
Pentano (l)	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	36
Hexano (l)	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	69
Eikosano (s)	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{18}\text{CH}_3$	205 (36,4)

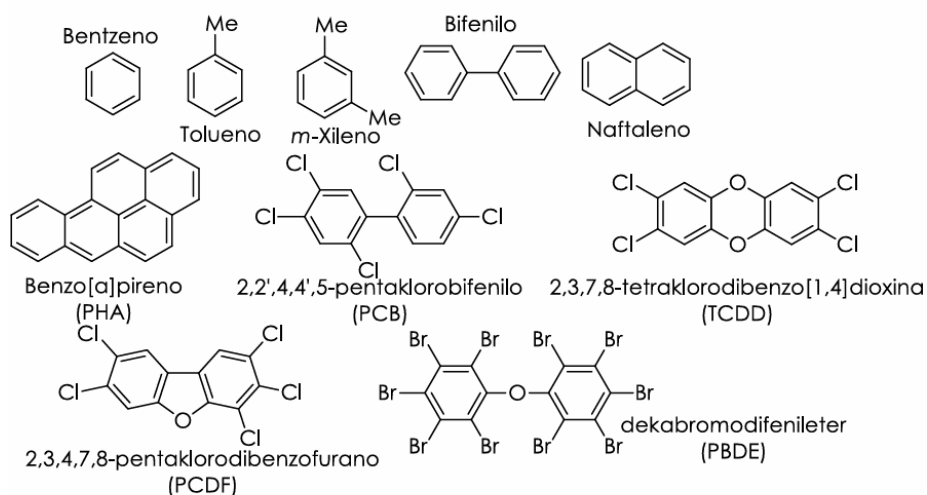
ii. alkano adarkatuak



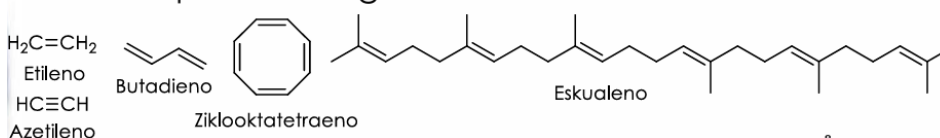
iii. zikloalkanoak



IV. aromatikokoak



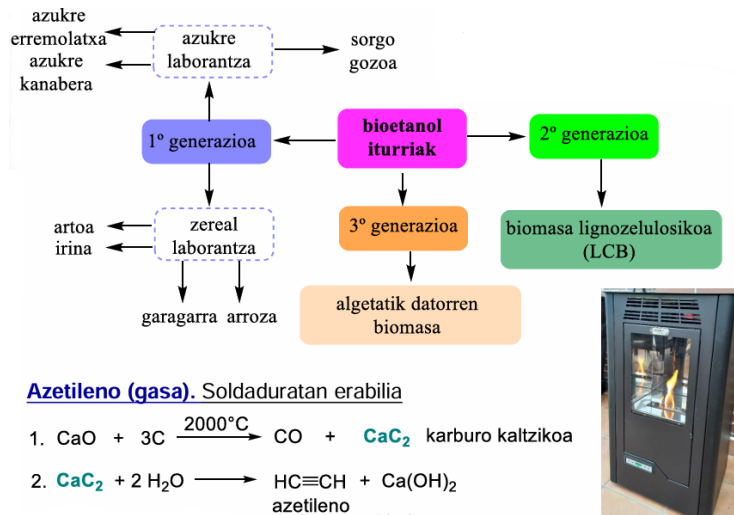
v. Konposatu asegabeak



v. Konposatu asegabeak

Etilenoa (gasa), $\text{CH}_2=\text{CH}_2$, munduan gehien ekoizten den konposatu organikoa da, ehunka produktu fabrikatzeko erabiltzen da, adibidez, polietilenoa, polibinil kloruroa (PVC), poliestirenoa, etilenglikola (izotz kontrakoa), itsasgarritan, disolbatzailetan, garbigarritan, ... Etileno gehiena hidrokarburoen cracking bidez ekoizten da.

Bioetilenoa* landaretatik lortzen den etanola (bioetanola) temperatura eta presio altutan deshidratatuz ekoizten da. Prozesu honetan aluminio oxidoa (Al₂O₃) erabiltzen da katalizatzaile gisa. Bioetanol gehiena arto, azukre erremolatxa, azukre-kanabera eta sorgo gozoaren azukreen hartidura bidez ekoizten da. Modu honetan CO₂ isuriak 70-80% murrizten dira.

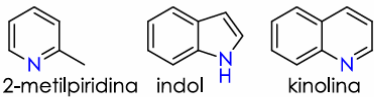


b) Hidrokarburoak ez direnak

i. sufrea duten konposatuak



ii. nitrogenoa duten konposatuak



iii. oxigenoa duten konposatuak

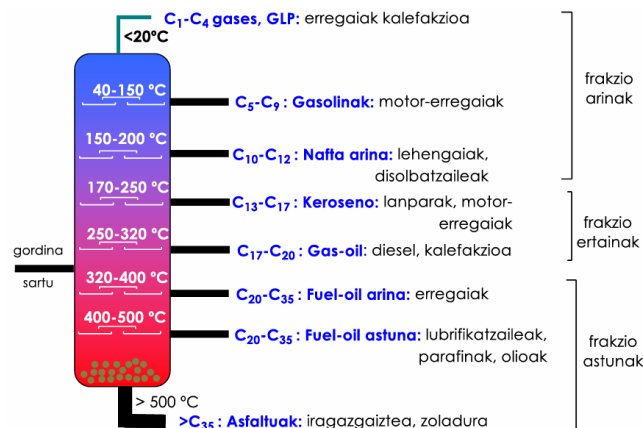


iv. metalak dituzten konposatuak: V, Ni, Co eta Fe
(VO²⁺) V₂O₅

Banadilo katioia

Banadio pentoxidoa

PETROLIOAREN FRAKZIOAK



4.1.4 PETROLEOAREN ETEKINA HOBETZEKO METODOAK

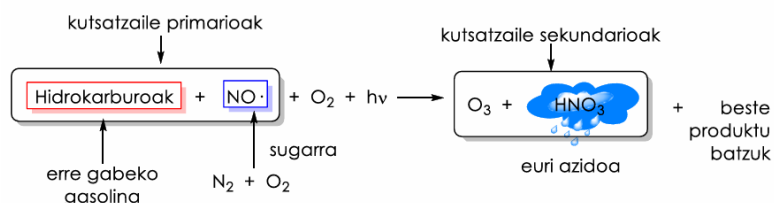
• **Oktano indizea (O.I):** Gasolina baten leherketaren aurreko erresistentzia adierazten du.

- Gasolina bat lehertu baino lehen zenbateraino konprimi daitekeen esaten digu.
- Gasolinak motorrak zenbat "kolpatzen" dituen adierazteko eskala da.

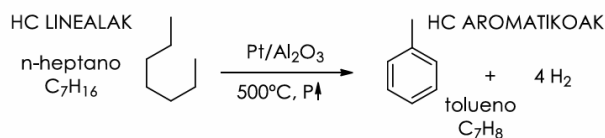


a. Gehigarri antidetonatzaileen erabilera

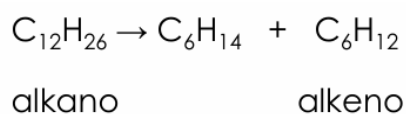
Konposatua	Oktano indizea	Konposatua	Oktano indizea
Bentzeno	106	metanol	116
Tolueno	118	Etanol	112
<i>p</i> -Xileno	116	MTBE	116



b. Erreformatze katalitikoa



c. **Petrolioaren crackinga (pirolisia):** Gasolina kantitate handiagoa lortzeko



2 cracking mota daude:

- **Cracking termikoa:** Temperatura (450-750 °C) eta presio (70 atm) altuetan egiten da, erreakzio erradikalarioak ematen dira.
- **Cracking katalitikoa:** Katalizatzaileak erabiltzen dira, adibidez zeolitak, 500°C tenperaturak eta presio baxuagoak, erreakzio ionikoak ematen dira.

Pirolisia berotze bidez materia organikoaren deskonposizio/transformazioa da. Temperatura altuetan eta airerik (oxigenorik) gabe egiten da.

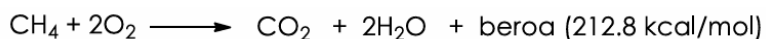
- Hidrokarburo kate luzeak kate motz eta interesgarriagoak emanez apurtzen dira.
- Gaur egun, pirolisia hiriko eta industriako hondakin birziklaezinak edo birziklatzen zailak direnak tratatzeko erabiltzen da, honela erregaiak eta gasa lortuz.
- Pirolisiaren adibide ezagun bat, egurretik, egur ikatza lortzearena da.

4.2 PETROLIOA ETA BERE DERIBATUEN ERREAKZIO KIMIKOAK

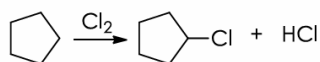
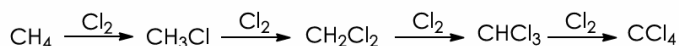
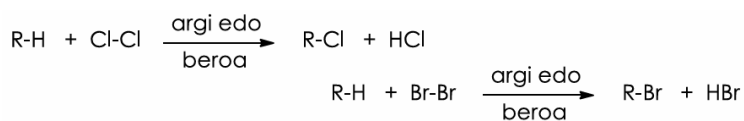
HIDROKARBURUEN ERREAKZIO BATZUK

4.2.1. ALKANO ETA ZIKLOALKANOAK

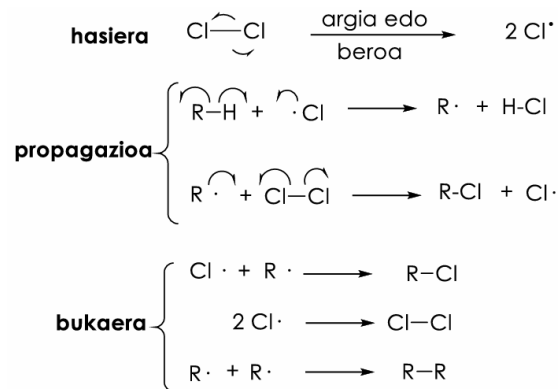
Oxidazioa: konbustio edo erreketeta



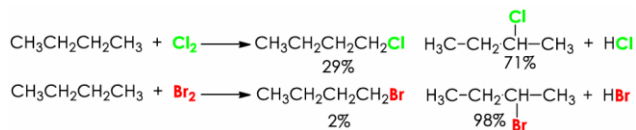
Halogenazioa:



Erreakzio-bidea: erreaktiboek produktuak emateko bidean gertatzen den loturen apurketa eta sortze-prozesuaren pauso pausoko azalpen zehatza da. Halogenazioaren kasuan



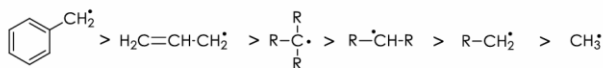
• **Halogenazioaren emaitzak:**



Erradikalen eraketa-abiadura:

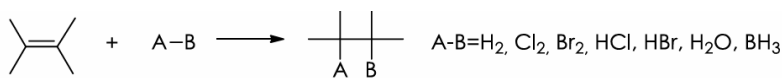
Kloro Tertiario > sekundario > primario
5.0 3.8 1.0

Bromo Tertiario > sekundario > primario
1600 82 1.0

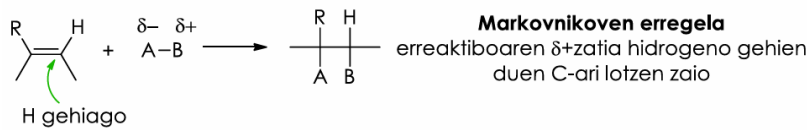


4.2.2 ALKENO ETA ALKINOAK

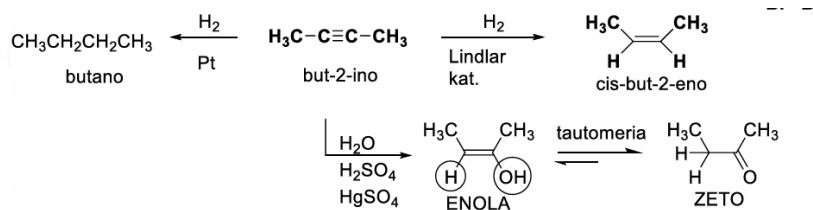
Adizio erreakzioa:



Alkenoa eta erreaktiboak asimetrikoak badira:

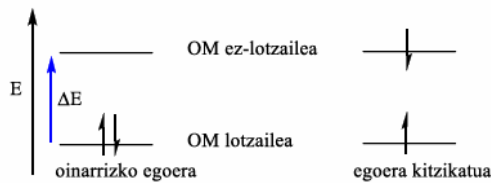


Adibideak:



Metodo espektroskopikoak:

- Espektroskopia ultramore eta ikuskorrek (UV-VIS) erradiazio elektromagnetikoa erabiltzen du.
 - UV---200-400 nm
 - VIS---400-800 nm
- Erradiazioak elektroiak kitzikatzen ditu et OM lotzailetatik OM ez lotzailera libreetara pasatzen dira
- Lambert-Beer legean oinarritzen da: $A = \log(I_0 / I) = \epsilon c l$



A: absorbantzia

I_0 : Argiaren intentsitatea sartzean

I: Argiaren intentsitatea lagina zeharkatzean

ϵ : absorbitate molarra

c: laginaren kontzentrazioa (mol/L)

l: kubetaren zabalera (cm)

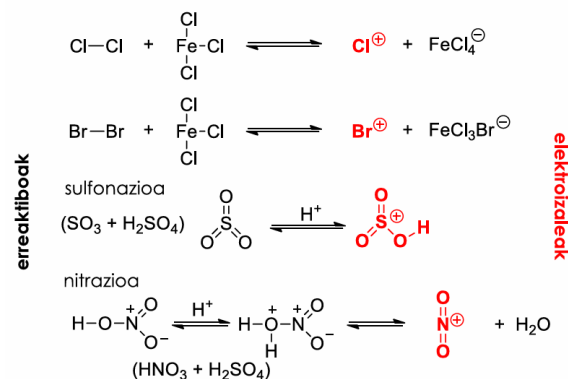
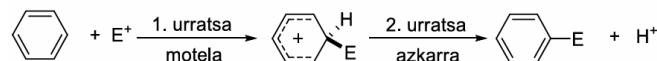
Lotura bikoitz konjokatu kop $\uparrow \rightarrow \lambda \uparrow$

(Batez ere sistema konjokatueta du interesa)

4.2.3 KONPOSATU AROMATIKOAK

- Konposatu aromatikoa: bere erreaktibitatea bentzenoarena bezalakoa duen konposatua. Konposatu baten π elektroiak eraztun guztian zehar deslokalizatuta daudenean eta deslokalizazio honek konposatua egonkorrago egiten duenean aromatikoa da.
- Hückelen erregela: eraztun konjugatu monozikliko lauak aromatikoa dira ($4n+2$) ($n=0, 1, 2, \dots$) π elektroi dituztenean.

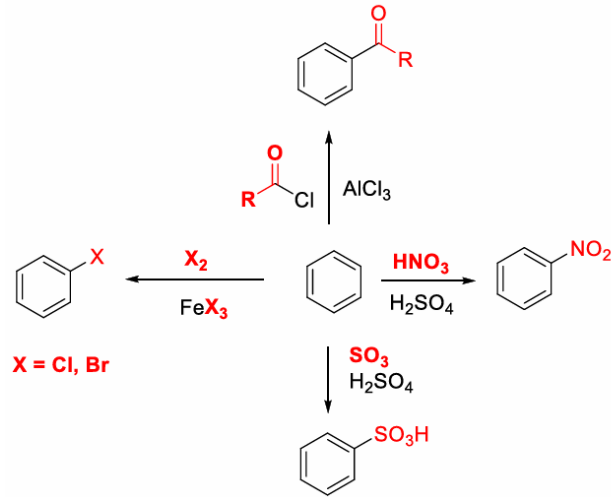
- **Erreakzioa: Ordezkapen elektroizale aromatikoa SEAr**



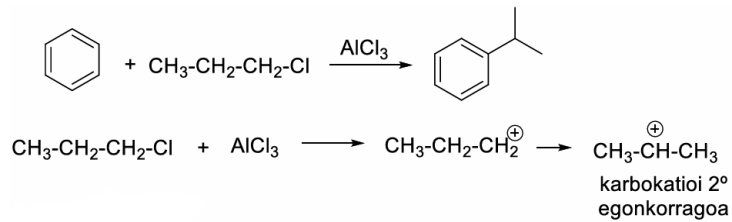
alkilazioa



azilazioa

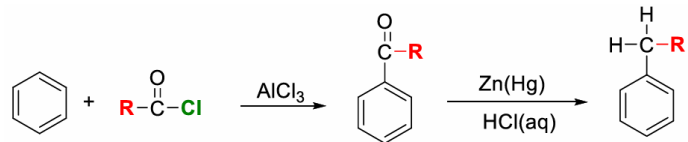


- **Karbokatioien egonkortasuna eta alkilazioa**



ALTERNATIBA:

Friedel-Crafts-en azilazioa eta gero Clemmensen-en erredukzioa



ORDEZKAPEN ELEKTROIZALEA

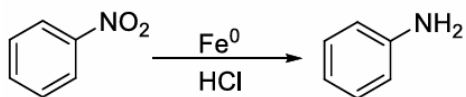
ordezkatzailea		
elektroi-emaitzak	-NH ₂ , -NHR, -NR ₂	amino
	-OH, -OCH ₃ , -OR	hidroxi, alkoxi
	-HN-C(=O)-R	azilamino
	-CH ₃ , -CH ₂ CH ₃ , -R	alkilo
	-F, -Cl, -Br, -I	halo
elektroi-erakartzaileak		azilo, karboxi
		karboxamido, karboalkoxi
		azido sulfoniko
	-C≡N	ziano
		nitro

ORTO ETA PARA
bideratzaileak

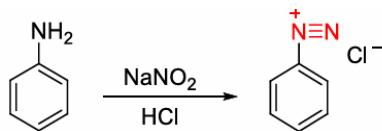
META
bideratzaileak

Azo konposatuak

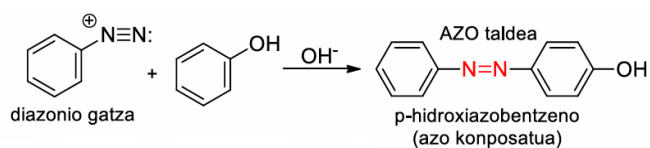
1.- Nitro taldea amino bihurtu



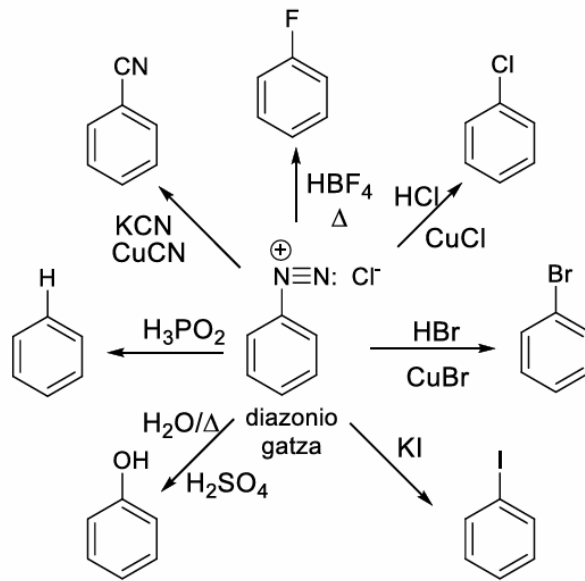
2.- Diazonio gatza prestatu



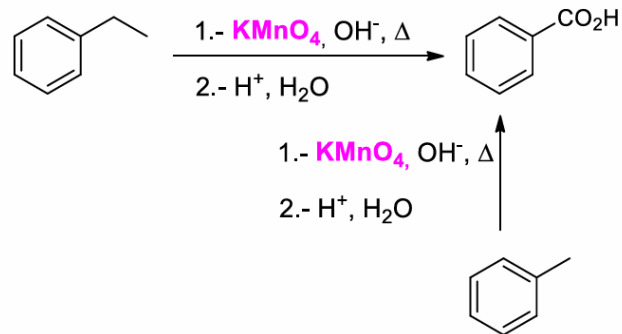
3.- **Azo akoplamendua:** arenodiazonio ioiak elektroizale gisara erabil daitezke oso aktibatuta dauden bentzeno eraztunekin (fenolak, anilinak eta N-alkilanilinak). Honela AZO konposatuak eratzen dira. Ordezkapena para- posizioan ematen da batik bat.



Diazonio gatzen erreakzioak

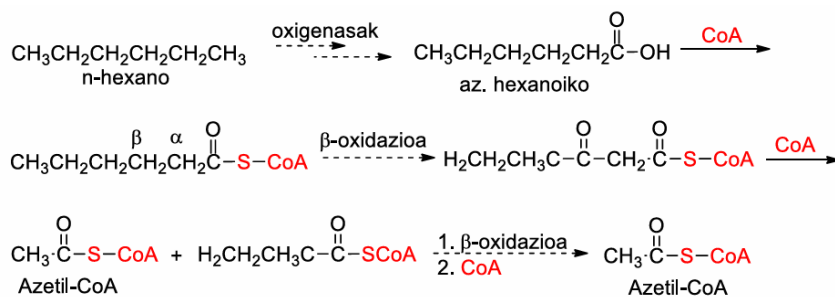


Eraztun aromatikoaren alboko katearen oxidazioa

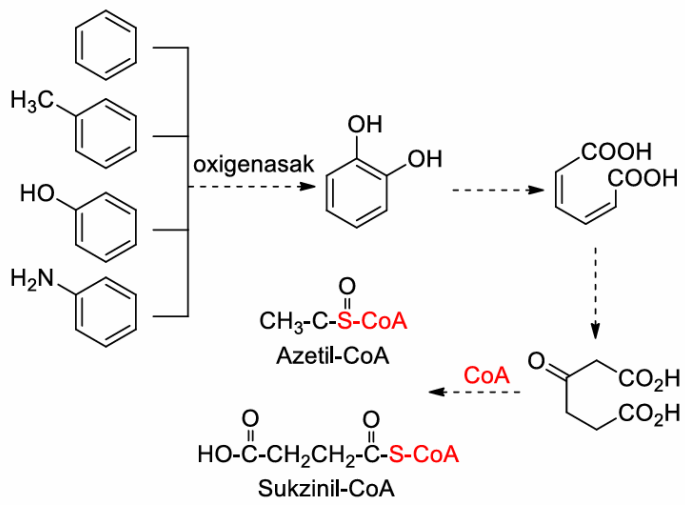


Biodegradazioa

•Alkanoak



•Arenoak










5.GAIA: POLIMEROAK

5.1. SARRERA

Definizioa: monomero deituriko unitate txikiagoen elkarketaren bidez eratzen diren makromolekulak. Monomero guztiak berdinak izan daitezke edo ez. Polimeroak naturalak edo sintetikoak izan daitezke.

Jatorri naturaleko polimeroak antzinatik erabiltzen dira bere propietateak baliatzeko: kautxua, lihoa, kalamua, kotoia (zelulosa), zeta, artilea (proteinak)

Gaur egun era guztietako polimero sintetikoak erabiltzen ditugu, plastikoak, elastikoak, zurrnak, forma, testura eta aplikazio askotakoak.

						
PET	HDPE	PVC	LDPE	PP	PS	Beste baztuk
Polietilen tereftalato	Dentsitate altuko polietileno	Polibinil kloruro	Dentsitate baxuko polietileno	Poli-propileno	Poliestireno	Adibideak:

Substantzia bat monomero izateko funtzionalitatea $(f) \geq 2$. Funtzionalitatea \approx molekularen funtzio talde kopurua.

- Azido azetiko, $f=1$
- Etilendiamina, $f=2$
- Glizerol, $f=3$
- Olefinetan: lotura bikoitza $f=2$ kontsideratzen da.

Polimerizazio maila=polimero molekula bat eratzeko konbinatu den monomero unitate kopurua.

Polimeroaren pisu molekularra=monomeroaren PM x polimerizazio maila

5.2. POLIMERO SINTETIKOEN IZAERA ETA PROPIETATEAK

Erabiltzen diren polimero gehienak konposatu organikoak dira.

Karbono eta hidrogenoaz gain oxigenoa, nitrogenoa, sufrea edo halogenoak izan ditzakete.

Salbuespena: silikona (polisiloxanoa). Bere hezurdura txandakatzen diren oxigeno eta silizio atomoz osatua dago

Polimero baten propietate fisiko eta kimikoak (urtze-puntua, erreaktibitate kimikoa, disolbagarrien aurreko erresistentzia, malgutasuna, ...) faktore hauen menpekoak dira:

- egitura • pisu molekularra • jatorrizko monomeroa

KRISTALINITATEA

Ez dituzte beste konposatu organikoen propietate kristalinoak, baina zati kristalinoak izaten dituzte.

Kristalinitate maila (GC) polimero semikristalinoaren zati kristalinoen portzentajea da. Solidotze prozesuaren hozte-abiaduraren eta katearen konfigurazioaren menpekoa da.

Kristalinitateak polimeroaren dentsitatea, sendotasuna eta zurruntasuna handitzen ditu.

Polimero amorfoak: gardenak ; kristalinoak: opako edo zeharrargitsuak.

TRANSIZIO TERMIKOAK:

T_g: beira-trantsizio tenperatura (glass transition temperature)

- Materiala biguntzen den tenperatura, likido likatsu bilakatur.

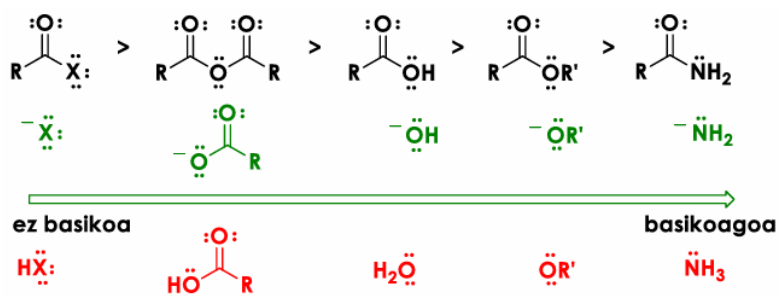
T_m: urtze tenperatura (melting temperature)

- Polimeroak egitura kristalinoa galdu eta solidoa urtzen den tenperatura, likido likatsu bilakatur.

5.3. POLIMEREN ERAKETARAKO ERREAKZIOAK

Alkenoen adizio erreakzioak

Azido karboxiliko eta deribatuen erreakzioak



Azido karboxilikoaren deribatuen prestakuntza:

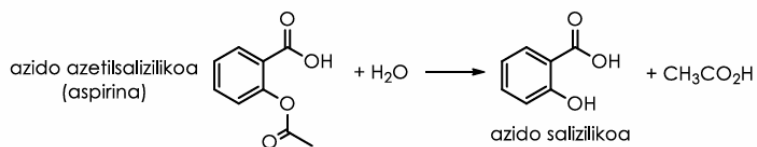
	R'-OH/H ⁺	SOCl ₂	PCl ₅

Azil haluroen eta anhidridoaren erreakzioak:

	R'-CO ₂ ⁻ Na ⁺	R'-OH	NH ₃ / R'-NH ₂	H ₂ O

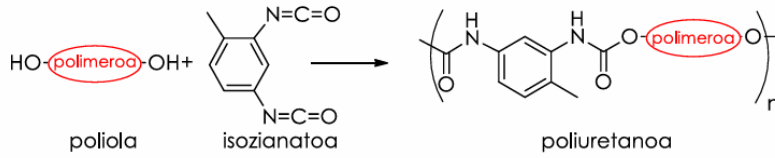
Esterren eta amidaren erreakzioak:

	NH ₃ / R'-NH ₂	NaOH	H ₂ O / H ⁺



Uretanoen formakuntza erreakzioak:

Betegarri gisa erabiltzen diren aparrak dira (eraikinen isolamenduan) eta zuntz eta material elastikoak egiteko (lycra)

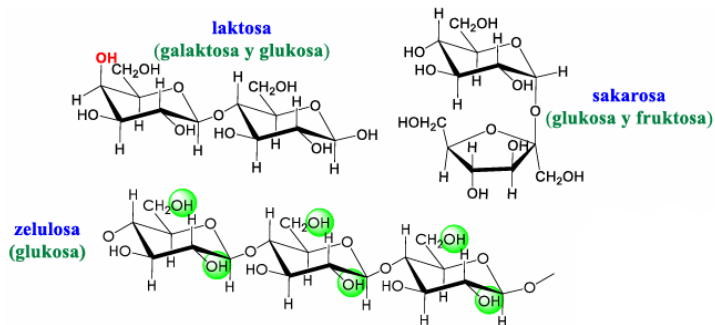


5.4. SAILKAPENAK, EZAUGARRIAK, SINTEZIAK...

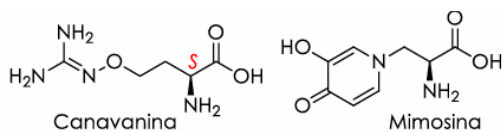
5.4.1. Jatorriaren arabera

Naturalak-Semisintetikoak-Sintetikoak

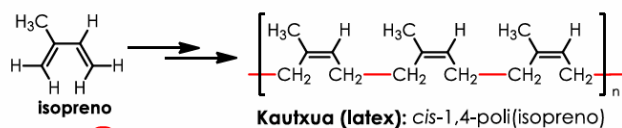
5.4.1.1. Polisakaridoak: karbohidratoak polihidroxialdehidoak edo polihidroxizetonak dira.



5.4.1.2. Peptido eta proteinak



5.4.1.3. Kautxua



5.4.1.4. DNA eta RNA

5.4.2. Iturriaren jatorriaren arabera

Bio-based (iturri berriztagarriak)- Oil-based (iturri fosilak)

5.4.3. Biodegradarritasunaren arabera

Bideogardarriak

-Baldintza aerobikoak: CO₂ eta H₂O

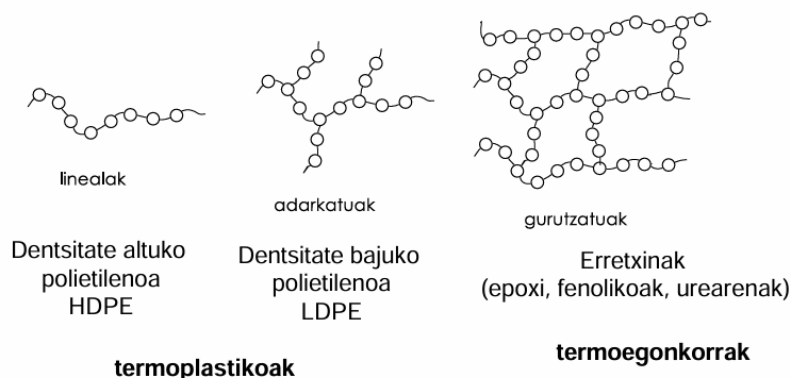
-Baldintza anaerobioak: CO₂, H₂O, H₂, SH₂, CH₄ y NH₃

-Entzimak ekoizten dituzten mikroorganismoak: bakterioak, onddoak, legamiak, algak

EZ biodegradagarriak

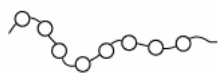
5.4.4. Egituraren arabera

Linealak-Adarkatuak-Gurutzatuak

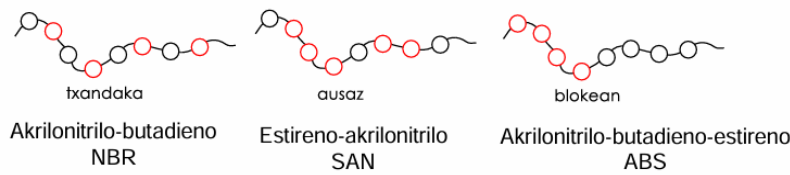


5.4.5. Konposizioaren arabera

Homopolimeroak: monomero guztiak berdinak dira



Kopolimeroak : bi monomero mota edo gehiagoz osatuak



5.4.6. Propietate fisikokimiko/erabileraren arabera

5.4.6.1. Zuntzak: Polimero linealak dira.

5.4.6.2. Plastikoak: Temperatura eta presio egokiarekin moldagarriak diren polimeroak dira. Horri esker era askotako formak eman dakizkieke

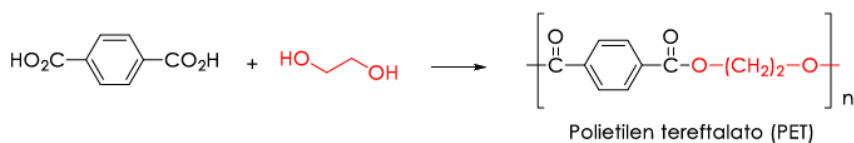
5.4.6.3. Elastomeroak : elastikotasun handiko polimeroak dira. Horri esker deformazio indar bat ezarri ondoren indar hori desagertzean hasierako forma erraz berreskuratzen dute (kautxua, neoprenoa).

5.4.6.4. Estaldurak: Normalean sustantzia likidoak izaten dira. Beste material batzuen gainazalean itsasten dira, honela propietate interesgarriak emanez, adibidez urratzearekiko erresistentzia.

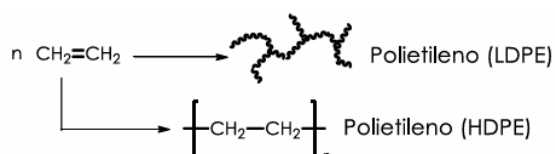
5.4.6.5. Itsasgarriak : Sustantzia hauek adhesio eta kohesio altua konbintzen dituzte, honela kontaktu superfizialaren bidez, bi gorputz edo gehiago itsasten dira.

5.4.7. Polimerizazio-erreakzioaren arabera

5.4.7.1. Kondentsazio polimerizaziokoak: monomeroaren zati bat galdu egiten da polimeroaren parte egiten denean. Erreakzioaren azpi-produktu dira ura, HCl eta horrelako molekula txikiak



5.4.7.2. Adizio polimerizaziokoak: monomero osoa polimeroaren parte da eta ez da azpi produkturik eratzten



5.4.8. Katearen hazkuntzaren arabera

5.4.8.1 Etapa-polimerizaziokoak

5.4.8.2 Kate-polimerizaziokoak

5.5. SUNTSIPENA

5.5.1 Ingurumen-degradazio prozesuak

Autooxidazioa:

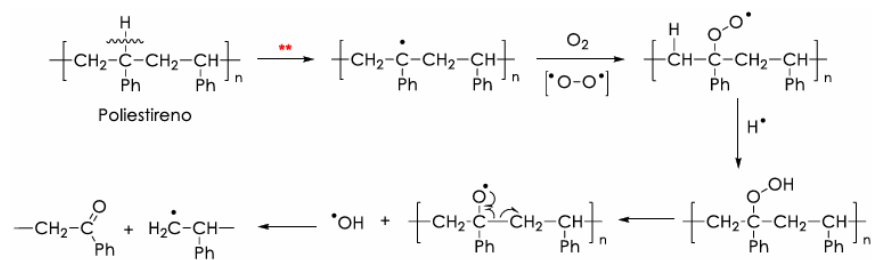
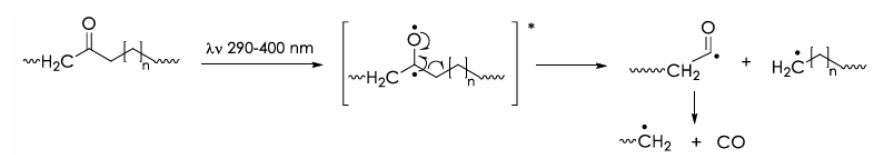
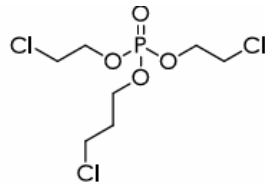
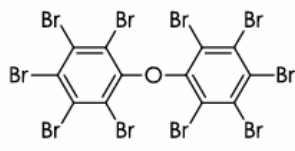
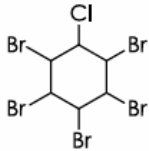


Foto-degradazioa:



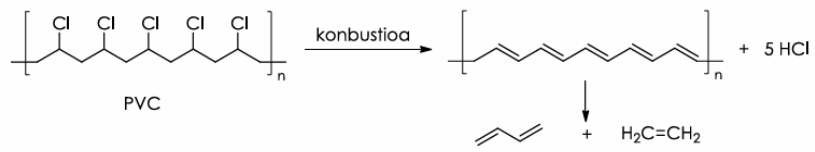
5.5.2 Konbustioa-errausketa

Gas toxikoak eraten dira: HCl, HCN, CO, HNO₃. Produktu toxikoak ere bai: PHA, dioxinak, dibenzofuranoak. Sugarraren sorrera atzeratzen duten aditiboak:



Konbustioa

- eliminazio erreakzioa: PVCaren deskonposizio termikoa



5.5.3 Birtziklatzea

6.GAIA: KONPOSATU AROMATIKOAK: PAHak, PCBak, dioxinak eta dibenzofuranoak, PDBEak

6.1. SARRERA

Konposatu aromatikoa: bere erreaktibitatea bentzenoarenarekin parekoa duen konposatua. Konposatu baten π elektroiak eraztun guztian zehar deslokalizatuta daudenean eta deslokalizazio honek konposatua egonkortzen duenean konposatu aromatikoa da.

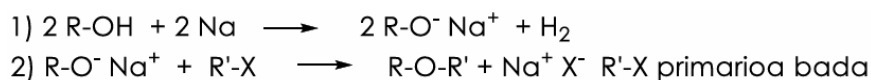
Hückelen erregela: eraztun konjugatu monozikliko lauak aromatikoa dira $(4n+2)$ ($n=0, 1, 2, \dots$) π elektroi dituztenean.

Konposatu aromatikoa karbomonoziklikoa izan daitezke (bentzeno deribatuak: tolueno, klorobentzeno, ...), fusioatuta egon daitezke (naftaleno, antrazeno, ...) bere zikloan heteroatomoak eduki ditzakete (monoheteroziklo aromatikoa: piridina, pirrol, furano, ...), beste ziklo batzuekin fusioatuta egon daitezke (DNA eta RNAREN base nitrogenatuak, dioxina eta dibenzofuranoak, ...), ...

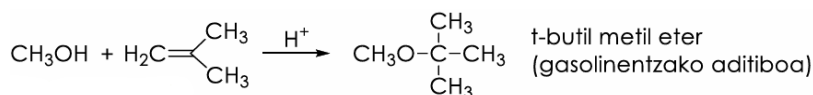
Eterren propietateak:

- Konposatu koloreak.
- Irakite puntua alkoholena baino baxuagoa (H-zubirik ez)
- Uretan disolbagarritasun eskasa.
- Inerteak: ez dute erreakzionatzen azido edo base diluituekin, ez oxidatzaile ez erreduktore arruntekin.
- Ez dute Narekin erreakzionatzen (alkoholek bezala)
- Disolbatzaile egokiak erreakzio organikoak egiteko

Prestakuntza: Williamsonen sintesia

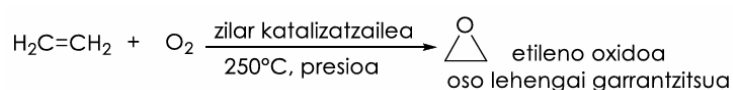


Beste metodo batzuk:

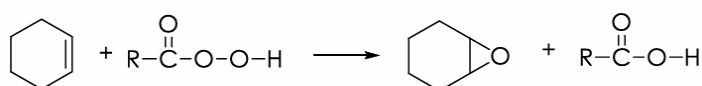


Eter ziklikoak

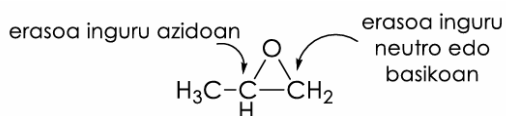
- Epoxidoak edo oxiranoak



- Alkenoak perazidoekin (mCPBAekin) oxidatuz prestatzen dira gehienak



- Ziklo hori oso erreakzionakorra da



6.2. KARBOZIKLO AROMATIKOAK

Grafenoa karbonoaren forma alotropiko bat da, karbonoek sp² hibridazioa dute eta elkarri lotuta daude lotura kobalenteen bidez. Egitura hexagonalak eratzen dituzte planoetan.

Grafenoa espazioaren bi dimentsiotan hedatzen den molekula aromatikoa erraldoia da.

Grafitoaren, karbonozko nanohodien eta fulerenoaren egiturazko osagai oinarritzakoa da.

- **Grafitoa** Van der Waals indarren bidez lotutako grafeno geruzaz osatua dagoela esan daiteke.
- **Nanohodi** bat hodi forman bilduta dagoen grafeno orri bat bezalakoa da.
- **Fulerenoak** esfera bat osatzeko itxi diren grafenoak dira.

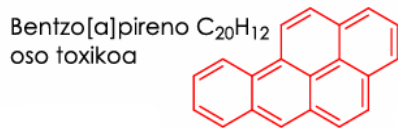
6.2.1. HIDROKARBURO AROMATIKO POLIZIKLIKOAK (PAH)

Bentzeno eraztun fusionatuak dituzte.

Petroliotik eratorriak. Iturri antropogenikoak. Izarren arteko espazioan ere aurkitu dira. Ingurumenean era askotako lekuetan aurkitu dira.

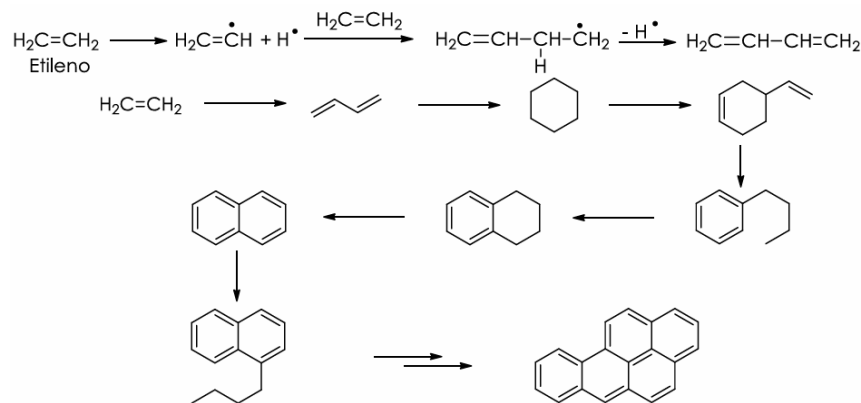
Propietateak:

Konposatu solidoak, hegazkortasun txikikoak, uretan disolbagarritasun eskasa, oso iraunkorrak, ingurumenarekiko eragina: minbizia eragiteko gaitasun izan dezakete. Toxikoenetakoa, bentzo[a]pireno:

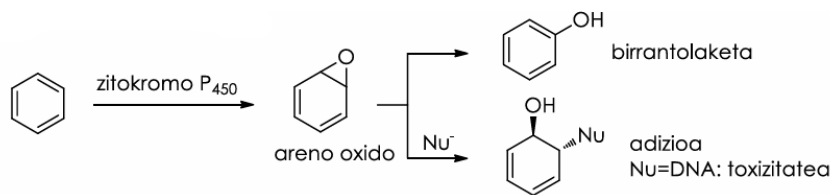


HAP iturriak: Bentzo[a]pirenoa ekoizten duten prozesuak

Konbustio partziala. Erradikalen eraketa



Metabolismoak eragindako toxizitatea: birrantomaketa azkarra, toxizitate txikia



Metabolismoak eragindako toxizitatea

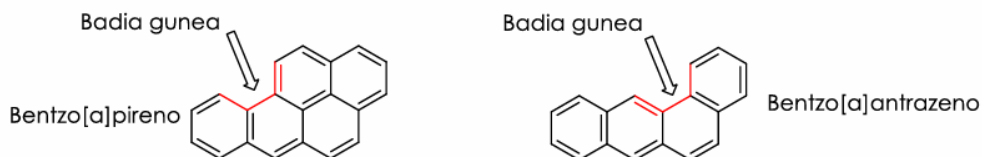
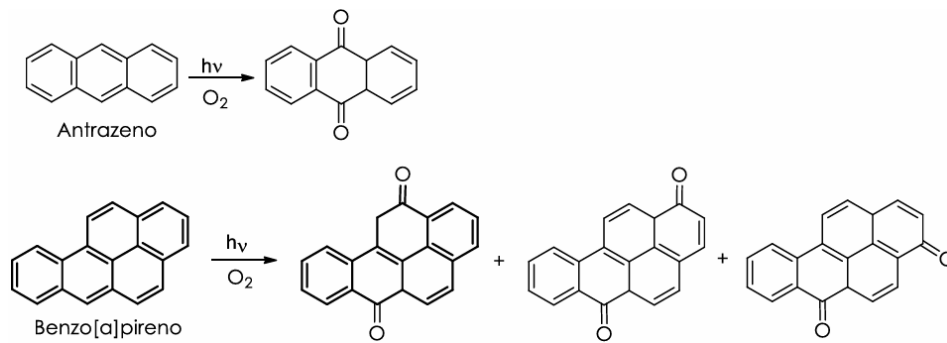
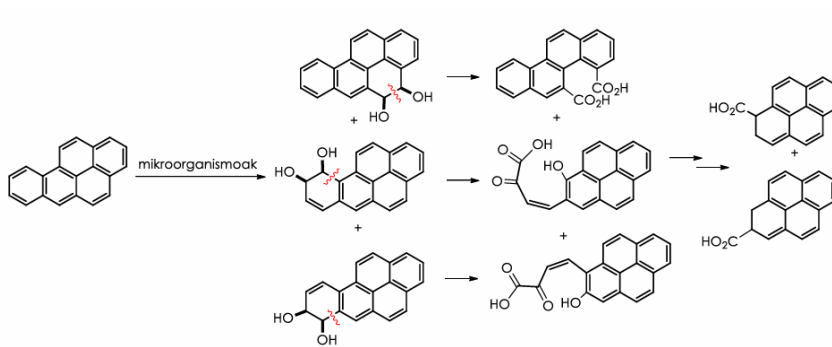


Foto-degradazioa: konposatu hauek konjugazio handikoak direla eta argi UVa ederki xurgatzen dute, beraz, foto-degradazioa da deskonposaketarako biderik eraginkorrena.



Bio-degradazioa



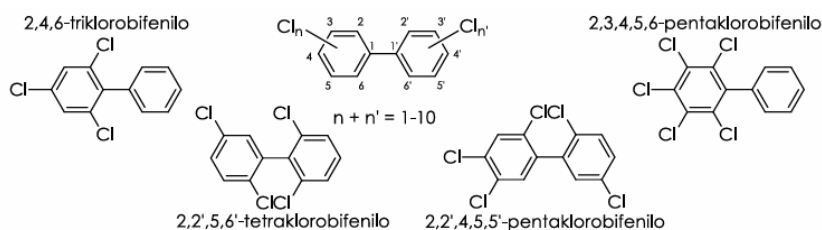
6.2.2. BIFENILO POLIKLORATUAK (PCB)

1985etik erabiltzea eta komertzializatzea debeketuta dago: erreprodukzioarekiko toxikoak eta bio-metakorrak.

Biotaren gantzean metatuta gehienbat, zoru, jalkin eta ur inguruetan (kutsadura historikoa). Bi erabilpen nagusi:

- Itxian: ekipamendu elektrikoaren isurgai dielektrikoak. Isurketak: ihesak, suteak, isurketa ilegalak, eliminazio desegokia.

-Irekian: plagizidak, material ignifugoak, zigilatze gaiak, margoak, ... Isurketak: zabortegiak, lurrunketaren ondorio den migrazioa. Neurri txikiagoan: hondakinen errausketa, lurretan araztegiatiko lohiak zabaltzea, olioaren hondakinen errausketa. Baita ere PCBen biltegiak, itsasoetako eta ibaietako jalkinak eta portuetako lohiak.



Propietateak:

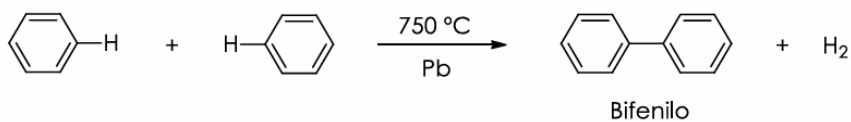
Egonkortasun termiko handia, kimikoki geldoak, ez sukoiak, konstante dielektriko handia, lipofiloak: uretan disolbagarritasun eskasa, 70eko hamarkadan erabilpen handia: transformagailuen olioetan, osagai dielektrikoetan, fluido hidraulikoetan, berotututzaileetan, lubrifikatzailerak, plastifikatzaileak, itsasgarriak, pestizidak, tinduak eta argizariak.

Toxikotasuna: KOI

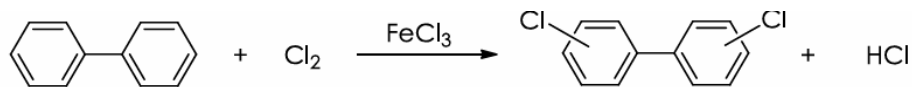
Klorazio maila (zuzenki proportzionala)

kloratutako posizioak (orto-, meta-, para-): planokideak toxikoagoak (dioxinen tankerakoak)

Bifeniloaren sintesia



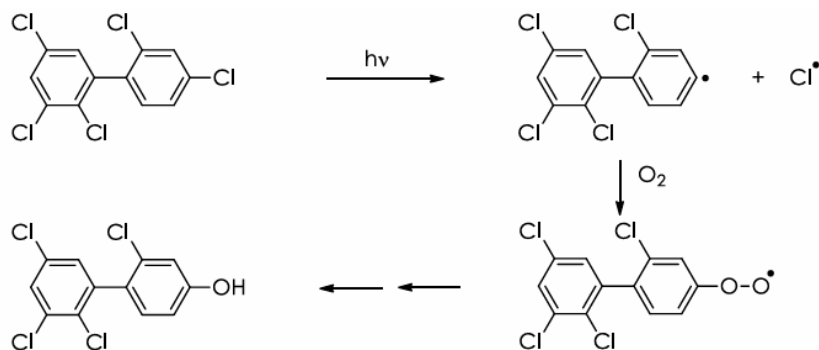
PCBen sintesia: bifeniloaren klorazio katalitiko



Konbustioan sortzen diren produktu desira-gaitzak



PCBen degradazioa:



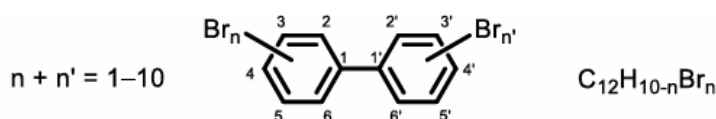
6.2.3. SUGARRAREN SORRERA ATZERATZEN DUTEN ADITIBOAK

plastikoak, poliuretano aparrak, material elektrikoa, TV aparatuak, ordenagailuak, eraikuntzako materialak eta ohialak.

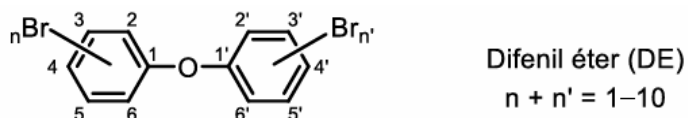
Propietateak:

uretan disolbagarritasun eskasa, lurrun presio txikia, kimikoki egonkorak, iraunkorak, bio-metakorak.

Bifenifo polibromatuak:



Difenileter polibromatuak:



6.2.4. BESTE KONPOSATU BATZUK

Aditibo askok eraztun aromatikoak dituzte bere egituretan. Erabilpen ugari dituzte: intsektizidak, kontserbagarriak, antioxidanteak, plastifikanteak, aromak, farmakoak, desinfektagarriak, koloragarriak...

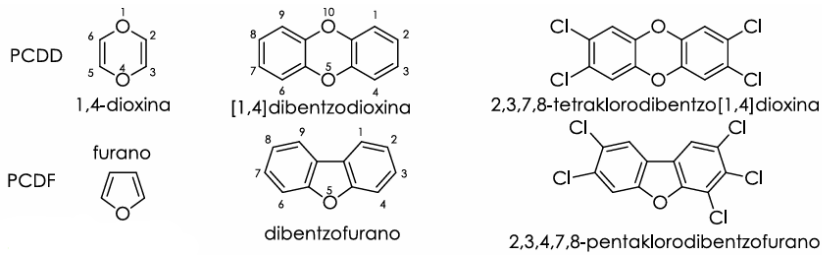
6.3. HETEROZIKLO AROMATIKOAK

Bere egitura karbonoa ez den beste atomo bat duten molekula ziklikoak heterozikloak dira. Eta gainera, Huckelen erregela betetzen badute, orduan aromatikoak dira.

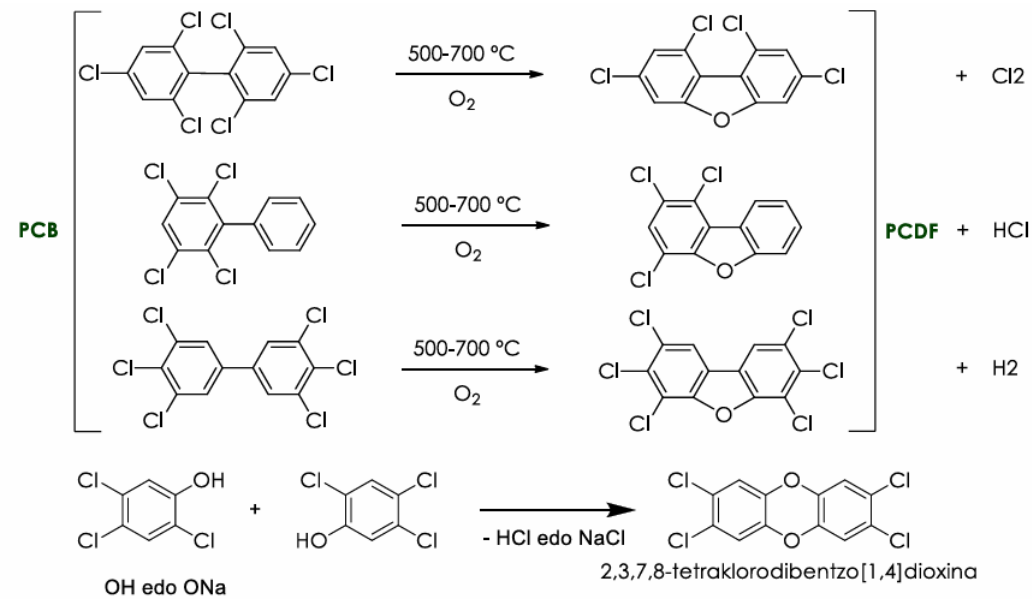
6.3.1. DIOXINA ETA DIBENTZOFURANOAK

Egitura kimikoa eta propietateak:

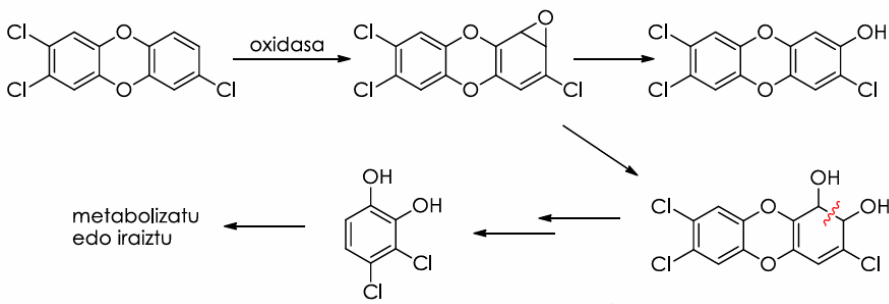
Konposatu solidoak, hidrolisiarekiko erresistenteak, hegazkortasun txikia, lipofiloak: uretan disolbagarritasun txikia...



Kutsadura-iturriak:



Degradazioa:



Toxikotasuna: Toxikotasun baliokidearen faktorea TEF, konpsatu bakoitzari ematen zaio dioxina toxikoenarekin konparatuz (bere balioa =1). TEF balioa kogenerearen kontzentrazioarekin biderkatuz nahastearen toxizitate baliokidea lortzen da (TEQ)

7.GAIA: PRODUKTU AGROKIMIKOAK: ezaugarriak eta bilakaera ingurumenean

7.1. SARRERA

Pestizidak hainbat ekintzatakoak eta talde kimikotakoak izan daitezke:

Ekintza	talde kimikoa
Intsektizidak	Organofosfatoak, karbamatoak, konp. organokloratuak, piretrinak eta piretroideak
Herbizidak	Karbamatoak, azido fenoxiazetikoak, triazinak, fenilureak
Fungizidak	Ditiokarbamatoak, konp. organokuprikoak eta organomerkurikoak
Semiokimikoak	Feromonak (esterrak) eta Alelokimikoak

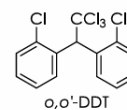
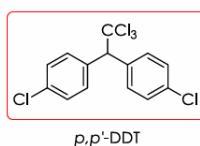
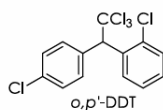
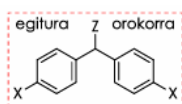
7.2. INTSEKTIZIDAK

Definizioa: Substantzia batek ekintza intsektizida du gizakiarentzat eta beste animalientzat hilgarriak ez diren kontzentrazioetan intsektuak era selektiboan hiltzen dituenean.

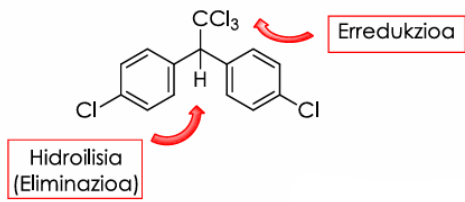
7.2.1. ORGANOKLORATUAK

7.2.1.1. Aromatikoak (DDT eta antzekoak)

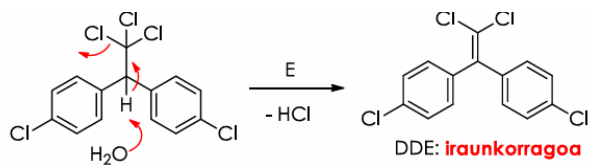
Prototipoa, DDT: 1,1'-bis(p-klorofenil)-2,2,2-trikloroetanoa □ Bere sintesian posizioko beste isomero batzuk ere eratzen dira.



Ingurumenean degradatzeko mekanismoak:



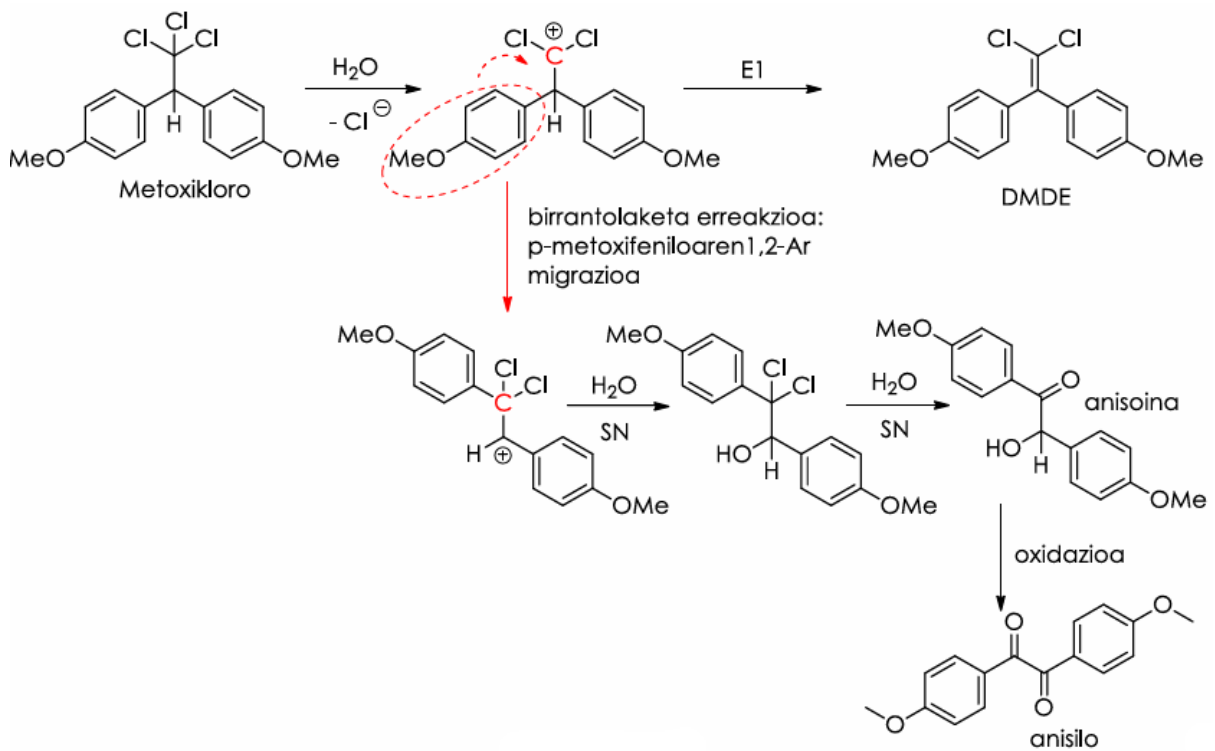
Eliminazioa: (deshidroklorazioa) pH=4-8



Erredukzioa: deshalogenazio erreduktorea

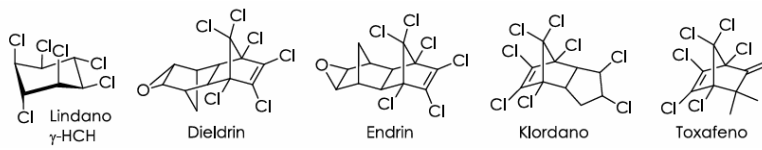


Metoxikloroaren hidrolisia (pH=4-8)



7.2.1.2. Ez aromatikoak

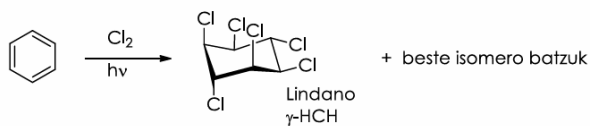
Konposatu kloratu mono- eta biziklikoak



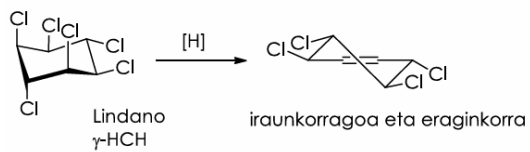
Ekintza-bidea: GABAren hartzailearen inhibizioa: konbulsioak



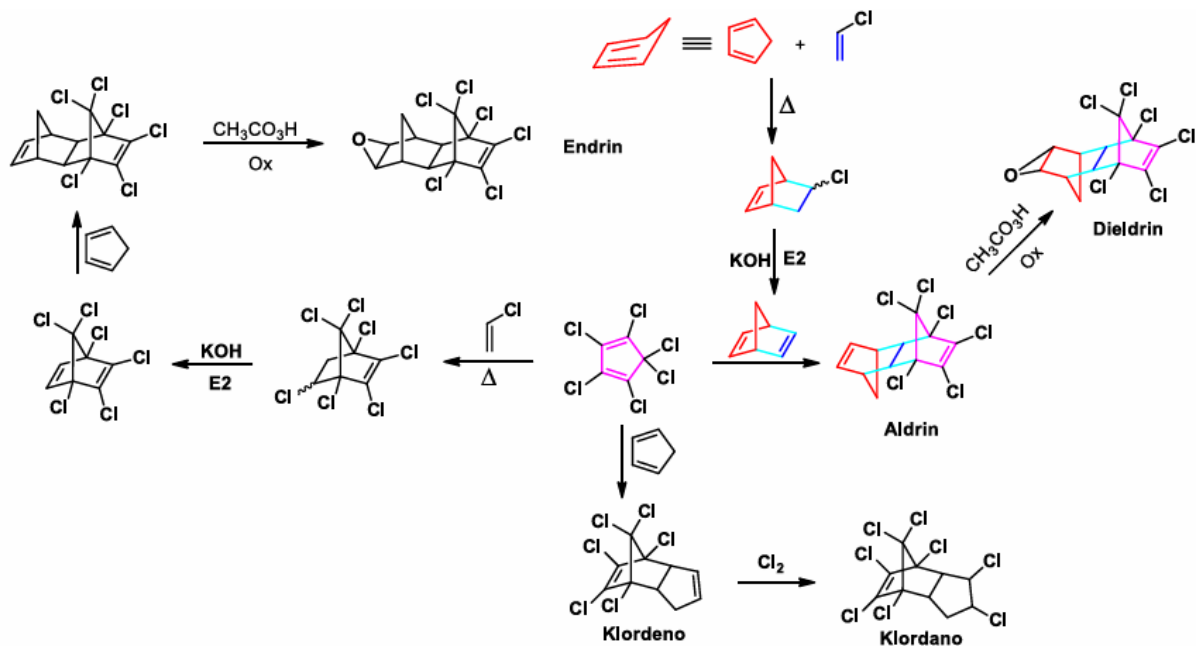
Sintesia:



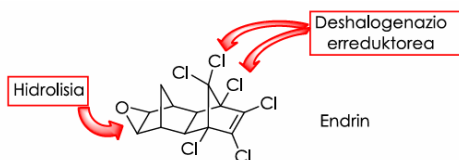
Ingurumeneko degradazio-bideak: albo-deshalogenazioa



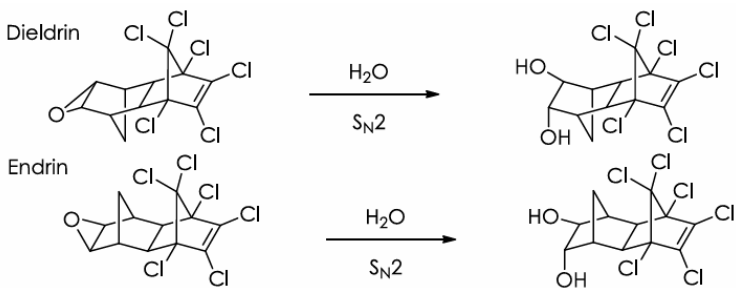
Hexakloroziklopentadienoaren deribatuak. Biziklo polikloratuen Sintesia: Diels-Alder erreakzioa



Ingurumeneko degradazio-bideak: ur ingurunetan iraunkorrak



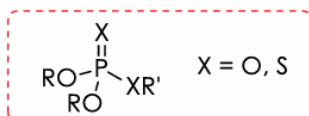
Epoxidoaren hidrolisia



Deribatu terpeniko polikloratuak: hainbat isomeroren nahaste gisa komertzializatzen ziren.

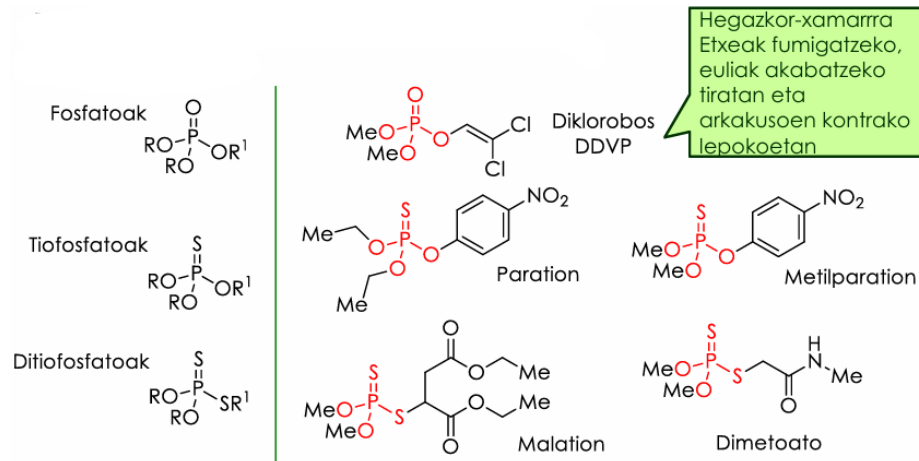
KOP: urtetan irauten dute

7.2.2. ORGANOFOSFORATUAK



Ekintza-mekanismoa: azetilkolina neurotransmisorea degradatzen duen entzima inhibitzen dute. Azetilkolina beharrezkoa da nerbio bulkada neurona batetik bestera transmititzeko.

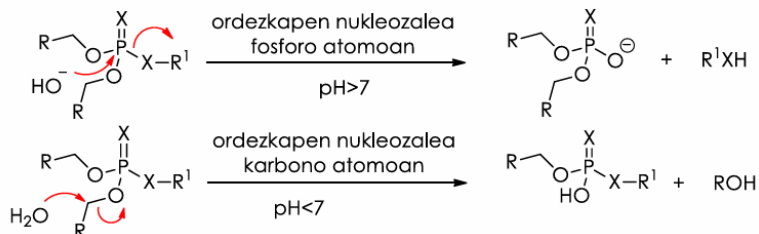
Adibide batzuk:



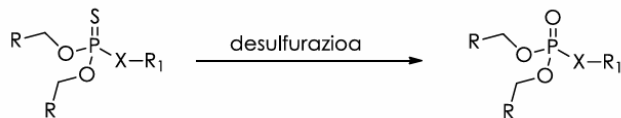
Ingurumeneko degradazio bideak:

Temperaturarekiko sentikorra. Metilparationen erdibizitza 8 egun udan eta 38 neguan

•Hidrolisia

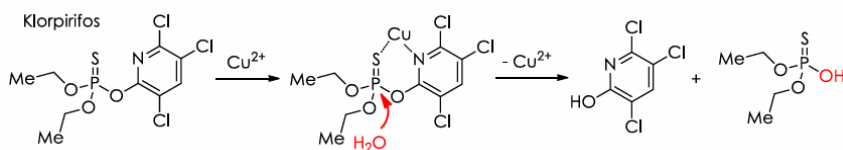


•Desulfurazioa



Cu²⁺ arekin katalizatutako hidrolisia

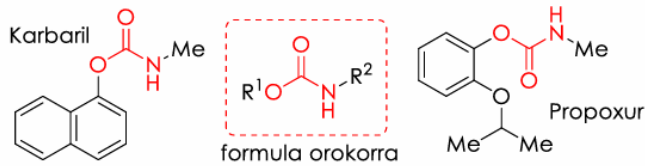
Metalekin konplexuak sor ditzaketen atomoak: zoruko metalekin kelatoak sortzen dituzte. Honek hidrolisia azkartzen du eta erdibizitza laburtzen.



7.2.3. KARBAMATOAK

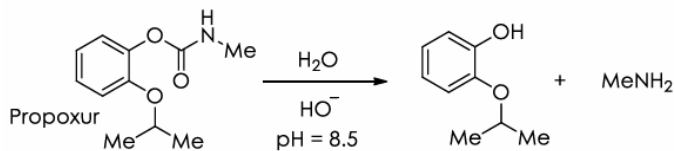
Organokloratu eta organofosforatuen ordezkak, garestiagoak. Intsektuak organofosforatuekin hiltzen ez direnean erabiltzen dira.

Ekintza-bidea: azetilkolinesterasaren inhibizio itzulkorra.

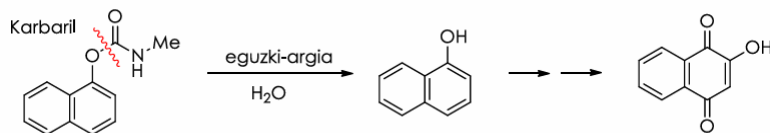


Ingurumeneko degradazio-mekanismoak

Hidrolisia ingurune basikoan:

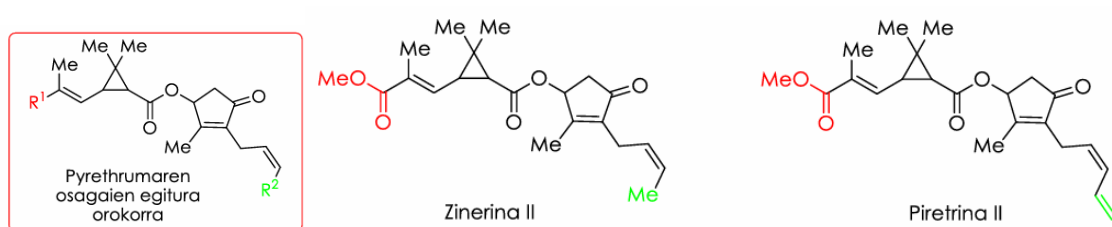


Fotodegradazioa:

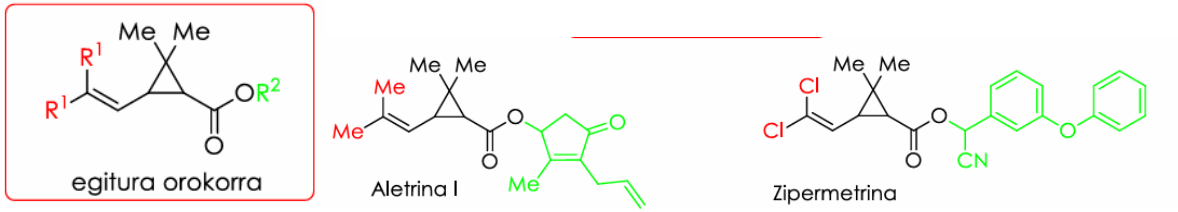


7.2.4. PIRETRINAK ETA PIRETROIDEAK

Piretrinak:



Piretroideak:



Piperonilo butoxidoarekin pestizida sinergikoa: zitokromo P450 inhibitzen du, pestizia asko desaktibatzen duen entzima-familia. Modu horretan intsektizidaren iraupena luzatzen du.

Ingurumeneko degradazio-bideak:

Hidrolisia

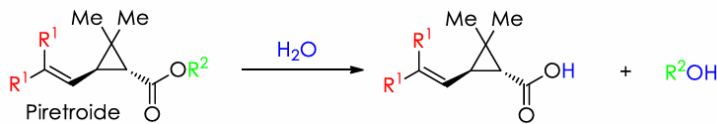
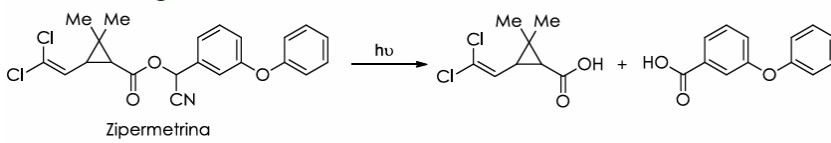
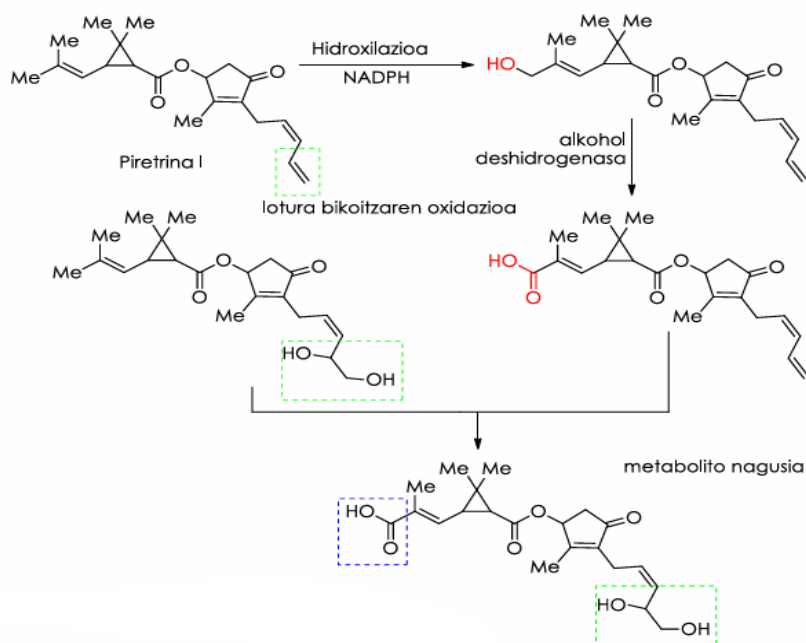


Foto-degradazioa:



Degradazio oxidatiboa: intsektu eta arratoietan



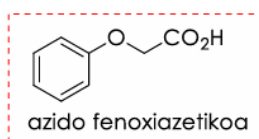
7.3. HERBIZIDAK

Definizioa: nahi ez diren landare edo belarrak ez ateratzeko erabiltzen den pestizida

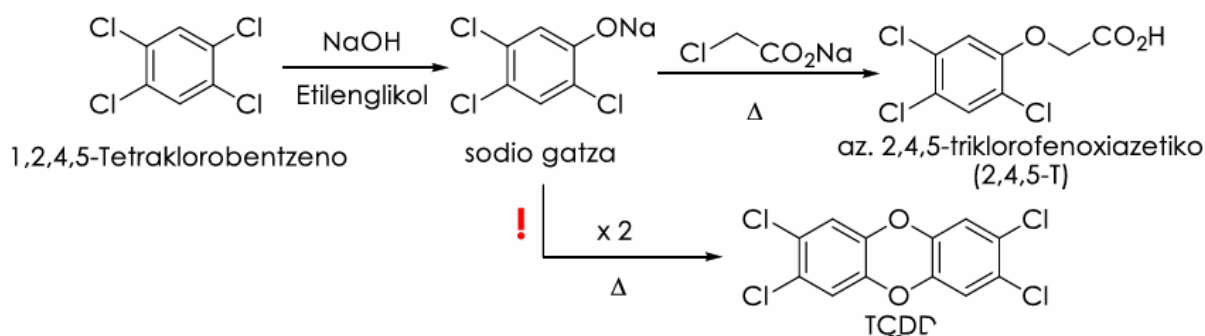
Sailkapena: sailkatzeko modu asko daude:

- Erabiltzeko modua (ukipena edo sistemikoa)
- Ekintza mekanismoa (zein entzima, proteina edo prozesu biokimikoren gain eragiten duen)
- Egitura kimikoa. Horren arabera mota hauek, adibidez:

7.3.1 AZIDO FENOXIAZTIKOAREN DERIBATUAK

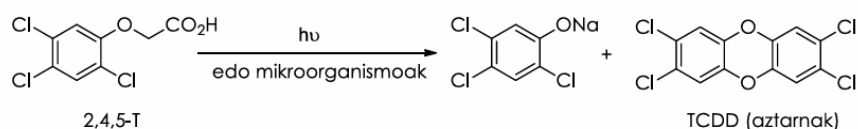


Sintesia:



Ingurumenean degradatzeko bideak:

Biotikoa edo foto-degradazioa

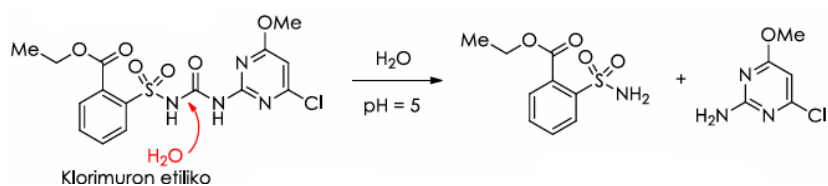


7.3.2 TRIAZINAK

Degradazioa

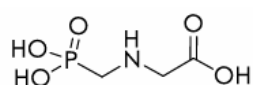
Foto-degradazioa

Hidrolisia:



7.3.4 GLIFOSATO

Europako Batzordeak 2022. urtean bere erabilera debekatu zuen, kantzerigenoa dela uste delako.



7.4. BIOPESTIZIDAK

Biopestizidak izurriteak tratatzeko produktuak dira, jatorria mikroorganismoetan edo produktu naturaletan dutenak. Oso eraginkorrak dira, ito espezifikoetara bideratuak eta ingurumenarekiko arrisku txikiagokoak.

7.4.1. MIKROORGANISMOAK: Onddo, bakterio alga birus eta protozoak edo euren sortutako konposatuak dira.

7.4.2. LANDAREETATIK ERATORRITAKO PRODUKTU NATURALAK: Limoneno, linalool, rotenona, beratridina, etabar luze bat.

7.4.3. SEMIOKIMIKOAK: Izaki bizidunen komunikazioarekin zerikusia duten substantziak, oso selektiboak eta eraginkorrak oso dosi txikietan

ALDEHIDO ETA ZETONAK

PROPIETATE FISIKOAK

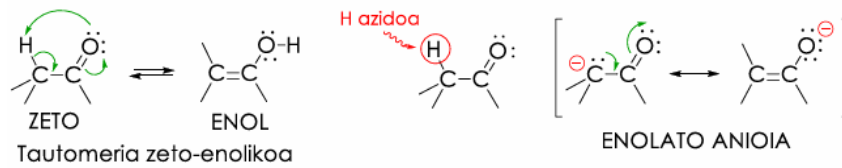
Karbonilo taldeak momentu dipolar konstantea du. C atomo gutxikoak uretan disolbagarriak dira. 6 C atomotik gora, ez dira batere disolbatzen uretan.

Hidrokarburuek baino irakite puntu altuagoak (dipolo-dipolo elkarrekintzak)

Alkoholek baino irakite puntu baxuagoak (H-zubirik ez)

PROPIETATE KIMIKOAK

Karbono karbonilikoa elektroizalea da, eta alboko karbonoaren H-a, azidoa.



7.5. ONGARRIAK

Definizioa: lurra emankorragoa bihurtzeko erabiltzen den substantzia organiko zein minerala da.

-organikoak: animal- giza- landare- edo jaki- hondakinetatik edo antzeko beste iturri organikoetatik datorren ongarria.

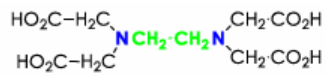
-mineralak: materia organikorik ez duen eta landareentzat erabilgarria den forma batean landareen hazkuntza eta garapenerako oinarritzkoa den elementu nutritibo bat (N, K, P) edo gehiago duen produktua.

Sustraiak: H₂O, O₂, substantzia mineral eta organikoak

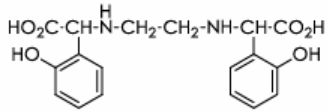
Hostoak: CO₂, O₂, H₂O eta solutuak.

N,P eta K duen ongarri baten konposizioa 3 zenbakiren bidez adierazi ohi da. Zenbaki horiek pisu-portzentajea adierazten dute, N kantitatea, P-rena P₂O₅ forman eta K-rena K₂O. Forman

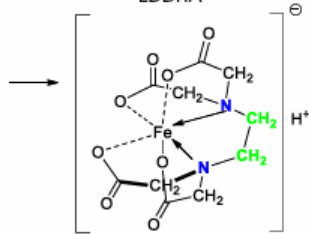
Ongarri gehienak ezorganikoak diren arren, badira hainbat ongarri organiko: konposta, simaurra, guanoa, turba, humusa, algak, urea edo Fe, Zn edo Mn bezalakoak emateko kelatoak egin ditzaketen substantziak



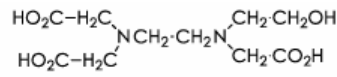
azido etilendiamino tetraazetikoa
EDTA



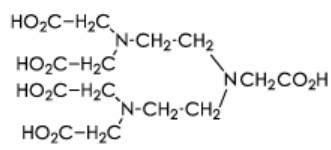
azido etilendiamino di(o-hidroxifenilazetiko)
EDDHA



EDTA kelatoa Fe³⁺-rekin



azido hidroxieti-etilendiaminotriazetikoa
HEDTA



azido dietilentriamino pentaazetikoa
DTPA

8.GAIA: XABOIAK

8.1. SARRERA

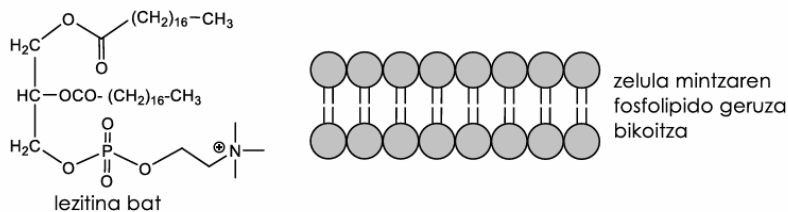
Tentsioaktiboak interfase (aire-ur, olio-ur) batean kokatzeko gaitasuna duten molekulak dira, eta bertako gainazal-tentsioa murrizten eta bi faseen propietateak aldatzen dituzte. Zati hidrofilo bat eta zati apolar hidrofobo bat dute. Surfaktante izena ere ematen zaie.



Tentsioaktiboek detergente moduan jokatzen dute: gantz-ur inguruneetan zikinkeria dispersatzeko gaitasuna eta horrexegatik izaten dira garbitzaile gehienen osagai. Beste erabilpen batzuk ere badituzte: emultsiogile, dispersiogile, hezegarri eta apar eragile.

Tentsioaktiboek edo surfaktanteek iturri fosiletan edo iturri berdeetan “surfaktante berdeak” izan dezakete jatorria.

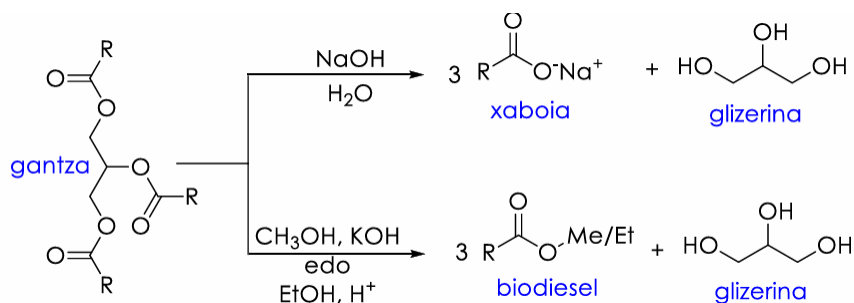
Zelulen mintzek tentsioaktibo egitura duten molekulak dituzte, fosfolipidoak. Horietako batzuk, lezitinak kasu, elikagaien industrian emultsiogile moduan erabiltzen dira.



Garbiketean detergenteak erabili aurretik xaboiak erabiltzen zen. Xaboiak gantz azidoen gatzak dira eta saponifikazio bidez lortzen dira.

•**Saponifikazioa:** esterraren hidrolisi basikoa. Disoluzio alkalinoak gantza bere osagaietan deskonposatzen du: alkohol bat (glizerola) eta kate luzeko gantz-azido baten gatz bat (xaboi bat)

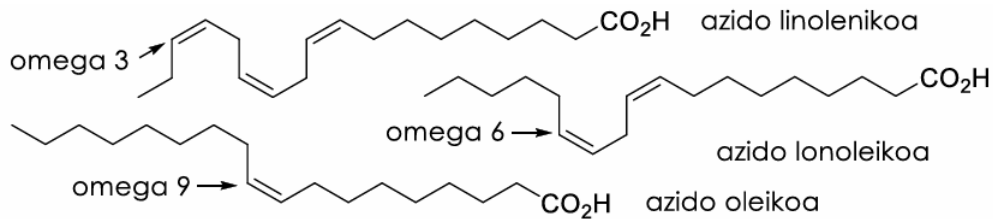
•**Transesterifikazio** bidez biodiesela lortzen da: esterraren erreakzioa metanol edo etanolarekin, inguru basiko edo azidoan



Gantzak solidoak dira giro tenperaturan; olioak, aldiz, likidoak dira, C=C lotura gehiago dituztelako. Lotura bikoitzak hidrogenazio katalitiko bidez erreduzitzen direnean olio likidoak gantz solido bihurtzen dira.

Gantz eta olio naturalen lotura bikoitzen konfigurazioa beti cis da. Olio begetalen hidrogenazio partziala burutzen denean cis loturak trans bihurtu daitezke. Honela sortzen dira trans gantzak, bihotzeko gaixotasunekin erlazionatuta daudenak.

Omega gantz azidoak: omega lotura bikoitzaren posizioa adierazteko erabiltzen den termino bat da.



8.2. TENTSIOAKTIBOAK

- Tentsioaktiboak bere **egituraren arabera** honela sailkatzen dira:

IONIKOAK

- Anionikoak: buru polar anionikoa dutenak: CO₂⁻, SO₃⁻, SO₄⁻
- Kationikoak: buru polar kationikoa dutenak
- Anfoteroak: bere egituran karga positiboa eta negatiboa dituztenak

EZ-IONIKOAK

Buru polarra karga gabekoa dutenak. Hidroxilo taldeak izan ohi dituzte

- **Disolbagarritasunaren arabera** honela sailkatzen dira:

HIDROFILOAK (orokorrean ionikoak) eta HIDROFOBOAK

- Beraien propietateak **4 parametro garrantzitsuren arabera** dira:

Kontzentrazio mizelar kritikoa (CMC)

Kontzentrazio minimoa espontaneoki mizelak sortzeko

Agregazio zenbakia (na)

Batazbestea zenbat molekula dauden mizelak sortzen

Hidrofilo-lipofilo balantzea (HLB)

Tentsioaktiboaren gaitasuna emultsio egonkorak sortzeko

Laino puntua(CP, cloud point)

Temperatura honetatik behera ez da disolbagarria uretan uherra

8.2.1 IONIKOAK

Tentsioaktibo anionikoak

- Perfluoratuak:

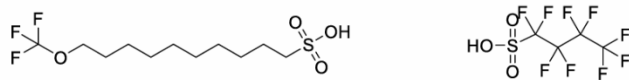
Tentsioaktiboaren karbono-katean fluor atomoak sartzean lortzen diren produktuak orbanen aldarazle moduan erabil daitezke margo eta bernizetan, labainketa hobetzen baitute. Sua itzaltzeko aparretan ere erabil daitezke.

Erabilienez 8 C-tako katea dute, eta surfaktante ionikoak dira. Bio-metakorrak dira, eta C-F loturaren indarra dela eta ez dira bio-degradagarriak, oso iraunkorrak baizik.



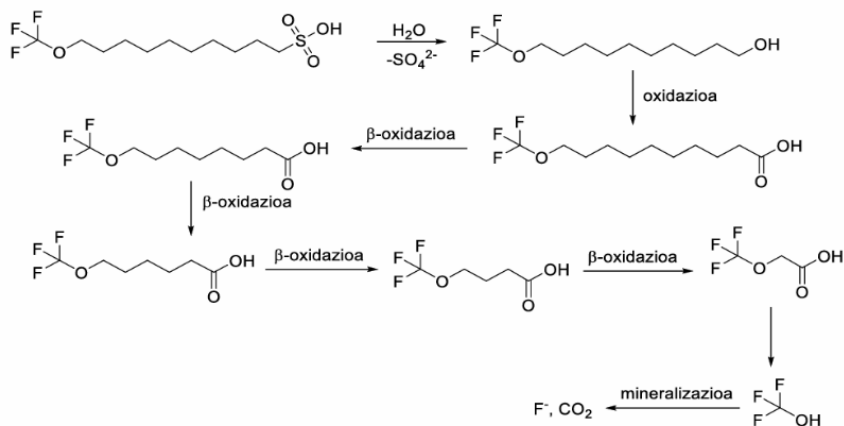
azido perfluorooktanoiko (PFOA) azido perfluorooktanosulfoniko (PFOS)

Konposatu hauetako gehienak debekatu egin dira. Azken urteotan ordezeko konposatuak diseinatu dira; batzuek C atomo fluorodun gutxiago dituzte, eta gaur dakigunaren arabera, ez lirateko metatuko, uretan oso disolbagarriak dira eta toxikotasun txikiagoa dute. Batzuk ionikoak dira:



azido 10-(trifluorometoxi)dekano-1-sulfoniko azido perfluorobutanosulfoniko (PFBS)

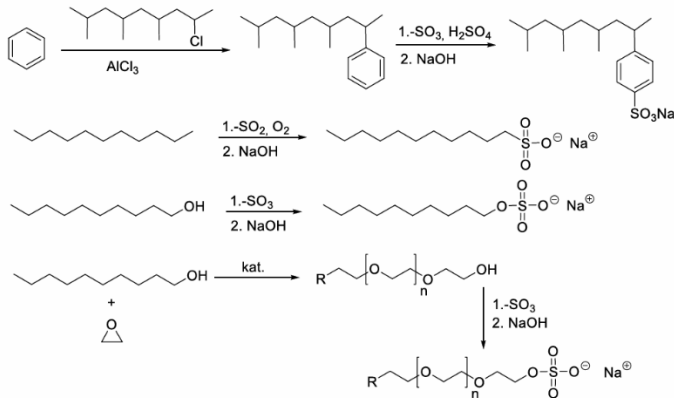
Konposatu perfluoratuaren biodegradazioa:



- **Fluorrik gabeko surfaktanteak:**

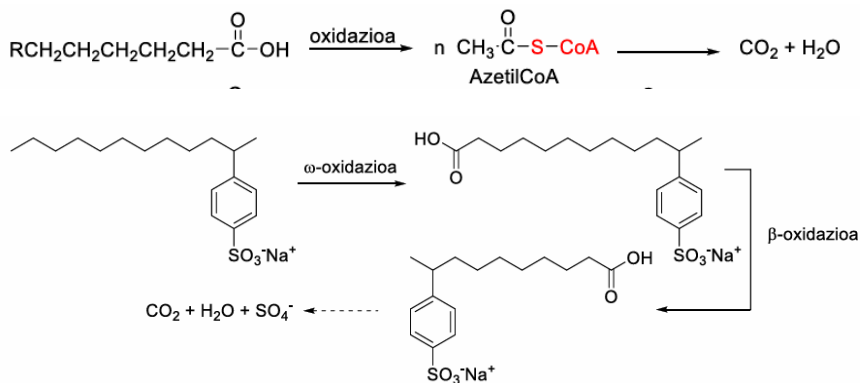


Fluorrik gabeko surfaktanteen sintesia:

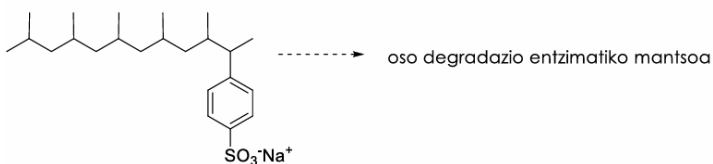


Fluorrik gabeko surfaktanteen biodegradazioa:

Kate linealeko tentsioaktibo anionikoak bio-degradagarriak dira eta oso toxikotasun txikikoak.



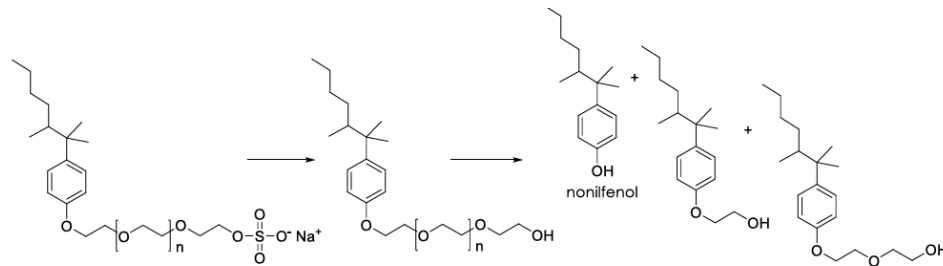
Albo-kateko adarkadurek degradazioa moteltzen dute. Hori dela eta, honelako alkilbentzenosulfonatoak tentsioaktibo iraunkorren taldean sailkatzen dira. Gaur egun ez dira erabiltzen baina pasa den mendeko erdi-aldera ibaietan ikusten ziren aparren erantzule ziren.



Fluorrik gabeko surfaktanteen degradazioa:

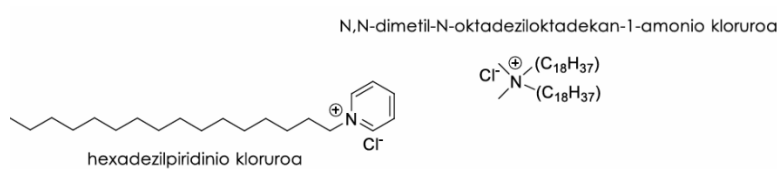
Tentsioaktibo polietoxilatuen taldeko erabilienak nonilfenolaren deribatuak dira.

Bio-degradazioak nonilfenola eta degradazio partzialeko hainbat produktu ematen du. Oso konposatu iraunkorrak dira, eta itsasoetako bizitzarentzat kaltegarriak.



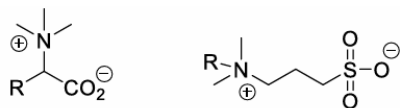
Tentsioaktibo kationikoak

Erabilpen nagusiak: leungarriak eta metalen korrosioaren inhibitzaileak.



Tentsioaktibo antoferoak

Xanpu leunetan erabiltzen dira (pH neutroa ile eta azalarekiko)



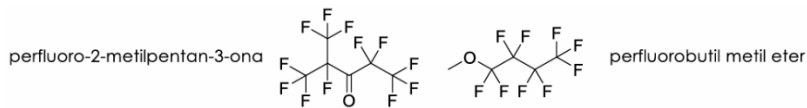
8.2.2 EZ-IONIKOAK

Parametro garrantzitsu bat **Hidrofilo/Lipofilo Balantzea (HLB)** eta parametro horren balorearen arabera erabilera ezberdinak daude. Balore horrek tentsioaktiboak emulsio egonkorrek sortzeko duen kapazitatea adierazten du, ur-olio sistematan edo olio ur sistematan.

Beste parametro garrantzitsu bat **laino puntua** da, temperatura horretan tentsioaktiboa ez da disolbagarria disoluzio urtsu batean eta horregatik makroskopikoki itxura uherra hartzen du.

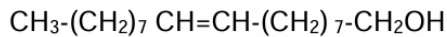
- **Fluoratuak**

eter, hidroxi edo zeto-funtzioak dituzte.

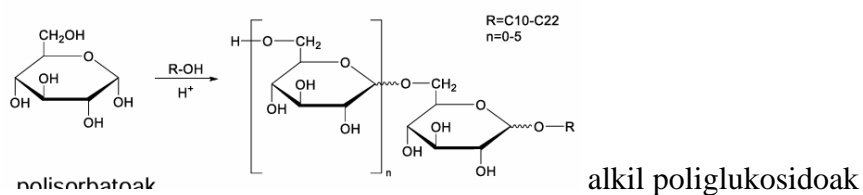


- Fluorrik gabekoak

Gehien erabiltzen direnak alkohol eta fenol polietoxilatuak dira, anionikoekin batera hauts erako garbigarrietan eta garbigarri likidoetan osagai nagusi gisa.



Orokorrean kate luzeko alkoholak, alkohol oleikoa, (Z)-oktadek-9-en-1-ola

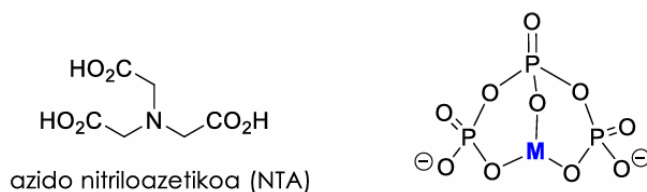


8.3. DETERGENTEAK

Detergente sintetikoak sortu ziren xaboiak ur gogorretan erabiltzen zirenean gertatzen ziren hauspeatze arazoak konpontzeko.

Detergenteek tentsioaktiboetaz gain beste hainbat gehigarri dute: zuritzaile optikoak, xaboa, entzimak, fosfonatoak, usaingozagarriak, etab.

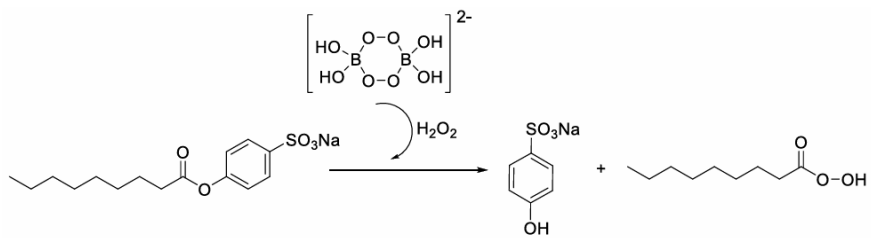
Laguntzailekideak. Katioiak kelatatzen dituzten agenteak dira, EDTA bezalakoak (7. gailan ikusia), edo NTA edo Na₅P₃O₁₀. Fosforo deribatu honek ur-ekosistemetara heltzen denean eutrofizazioa eragiten du.



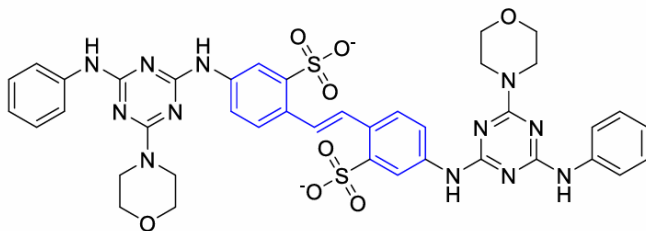
Entzimak. Hidrolisia eragiten duten entzimak gehitzen dira proteinak ezabatzeko: arraultz edo odol orbanak, adibidez.

Apar egonkortzaileak. Gehiegizko apar eraketa kontrolatzen dute.

Zuritzaileak. Arruntena sodio perboratoa da (NaBO₃·4H₂O). Honek H₂O₂ askatzen du uretan disolbatzean. Tenperatura baxuetan azido p-hidroxibentzenosulfonikoaren esterrekin batera erabiltzen da, disoluzioan perazido zuritzaileak eratuz.



Zurizaile optikoak. Argia absorbatzen dute 330-380 nm (UV) tartean eta ondoren igorri egiten dute 430-490 nm tartean, espektroaren zati urdinean. Honela zuntzek hartzen duten kolore horixkari aurre egiten diote.



4,4'-bis(4-anilino-6-morpholino-1,3,5-triazin-2-ylamino)-2,2'-stilbene disulfonate