

# Trifluralin in Azaleenblättern

**Peter Bützer**

## Inhalt

1	Trifluralin .....	1
2	Zur Substanz.....	1
3	Aufgabe .....	2
3.1	Simulationsdiagramm (Typ 4) .....	2
3.2	Zeitdiagramm .....	3
3.3	Dokumentation (Gleichungen, Parameter).....	3
3.4	Vergleich der Simulation mit realen Messdaten .....	4
4	Interpretation .....	4

## 1 Trifluralin

$C_{13}H_{16}F_3N_3O_4$ , MR 335,28 g/mol,  
alpha,alpha,alpha,-trifluoro-2,6-dinitro-N,N-  
dipropyl-p-toluidine, 2,6-Dinitro-N,N-dipropyl-  
(4-trifluormethyl)anilin, CAS No.: 1582-09-8  
Schmp. 49°C, LD50 (Ratte oral) >10000 mg/kg,



Abbildung 1: Azaleen

## 2 Zur Substanz

Von Eli Lilly & Co. 1960 eingeführtes  
selektives Herbizid zur Anwendung gegen  
Ungräser aber auch Unkräuter im Sojabohnen-,  
Getreide-, Baumwoll-, Raps-, Gemüse- und  
Sonnenblumenanbau. „Ranked as one of the  
most hazardous compounds (worst 10%) to  
ecosystems and human health.“<sup>1</sup>

Gehalt(e) bei der Anwendung: 480 g/l, Aufwandmenge: 2.5 - 3.5 l/ha  
Messdaten und Vergleichsgrafik<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Scorecard, Trifluralin, [http://www.scorecard.org/chemical-profiles/summary.tcl?edf\\_substance\\_id=1582-09-8](http://www.scorecard.org/chemical-profiles/summary.tcl?edf_substance_id=1582-09-8), 2006-07-28

<sup>2</sup> Fent Karl, Ökotoxikologie, Georg Thieme Verlag, Stuttgart/New York, 2003, 181

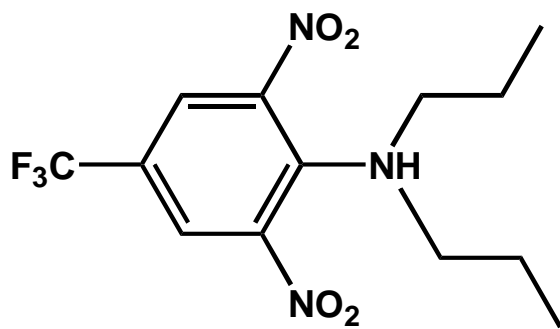


Abbildung 2: Trifluralin (Konstitutionsformel)

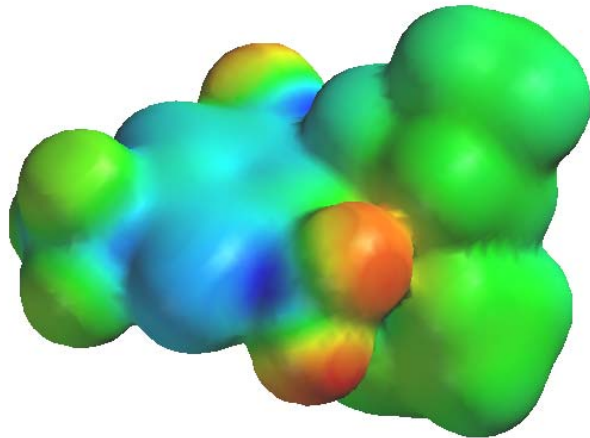


Abbildung 3: Trifluralin mit der Elektronendichteverteilung auf der Oberfläche: Rot: hohe Dichte, blau: kleine Dichte

Gefahrenkennzeichnung



### 3 Aufgabe

Man simuliere den zeitlichen Verlauf von Trifluralin in den Azaleenblättern, wenn vom Zeitpunkt 0 bis 420 Minuten Luft mit einem konstanten Gehalt an Herbizid zugeführt wird, und ab diesem Zeitpunkt nur nach reine Luft assimiliert werden kann.

Annahme: Der Abbau des Herbizids erfolgt mit einer Reaktion 1. Ordnung.

#### 3.1 Simulationsdiagramm<sup>3</sup> (Typ 4)<sup>4</sup>

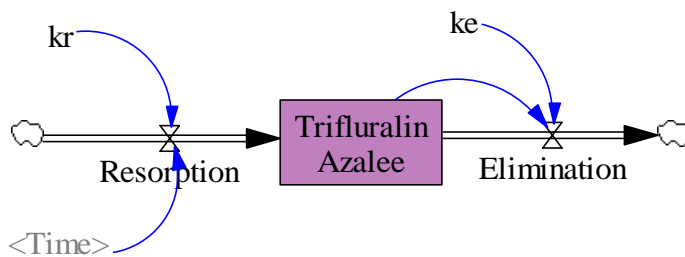


Abbildung 4: Simulationsdiagramm der Aufnahme und Elimination von Trifluralin durch Azaleen

<sup>3</sup> Simulations-Software: Vensim® PLE, Ventana Systems, Inc., <http://www.vensim.com/>

<sup>4</sup> Bützer Peter, Roth Markus, Die Zeit im Griff, Systemdynamik in Chemie und Biochemie, verlag pestalozzianum, Zürich 2006, S. 57

### 3.2 Zeitdiagramm

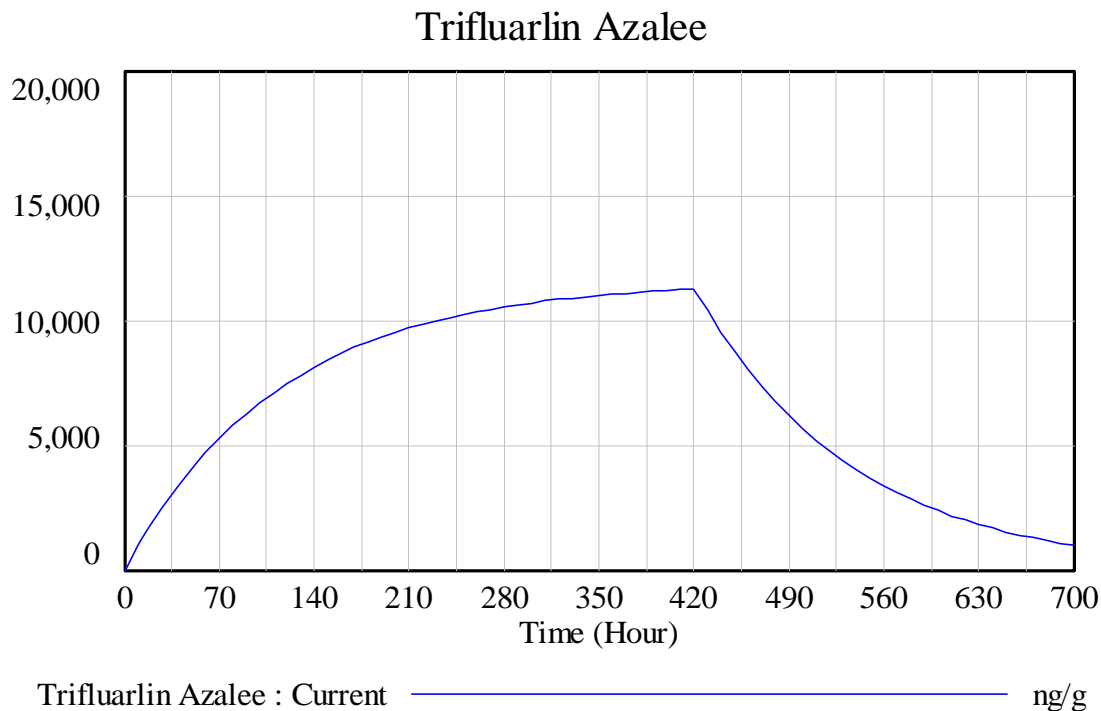


Abbildung 5: Zeitdiagramm der Aufnahme und Elimination von Trifluralin durch Azaleen. Nach 420 Stunden wird die Aufnahme unterbrochen.

### 3.3 Dokumentation (Gleichungen, Parameter)

- (01) Elimination=  $ke \cdot \text{Trifluarlin Azalee}$   
Units: ng/(Hour\*g) [0,?]
- (02) FINAL TIME = 700  
Units: Hour  
The final time for the simulation.
- (03) INITIAL TIME = 0  
Units: Hour  
The initial time for the simulation.
- (04)  $ke = 0.00866$   
Units: 1/Hour [0,?]
- (05)  $kr = 100$   
Units: 1/Hour [50,150]
- (06) Resorption= IF THEN ELSE(Time>420, 0 , kr )  
Units: ng/g/Hour [0,?]
- (07) SAVEPER = 10  
Units: Hour [0,?]  
The frequency with which output is stored.
- (08) TIME STEP = 1  
Units: Hour [0,?]  
The time step for the simulation.
- (09) Trifluarlin Azalee= INTEG ( +Resorption-Elimination, 0)  
Units: ng/g [0,?]

### 3.4 Vergleich der Simulation mit realen Messdaten

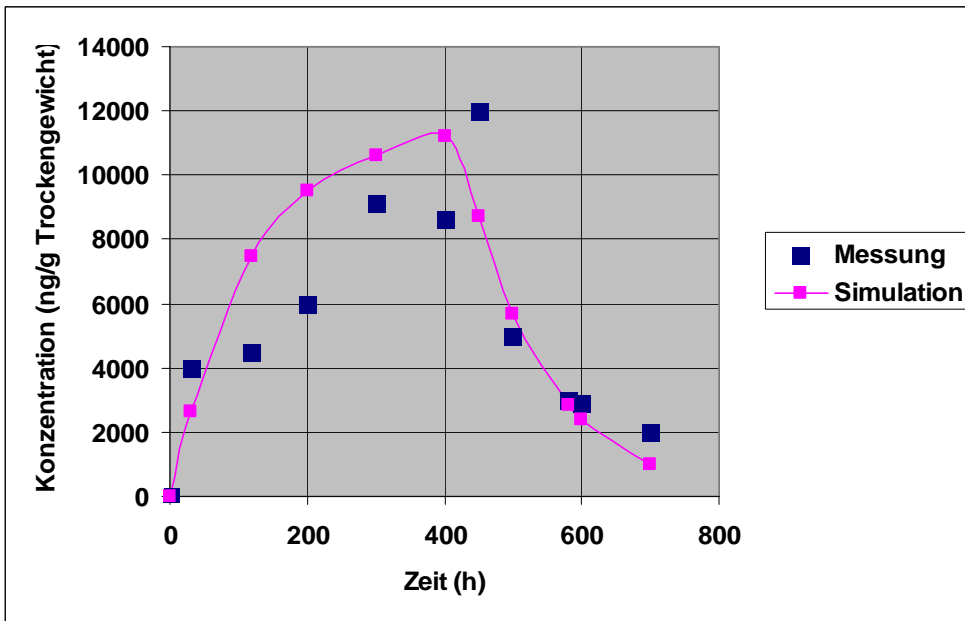


Abbildung 6: Vergleich von Messungen und Simulation

## 4 Interpretation

Die Dynamik ist durch das Modell grundsätzlich richtig erfasst.

Die stark streuenden Messdaten lassen sich mit diesem einfachen Modell im Verlauf sehr gut simulieren.