

готовить отраслевых и неотраслевых специалистов по проблемам окружающей среды.

В последние годы психологами делается акцент на когнитивное обучение, т.е. обучение, во – первых, направленное на повышение общего уровня, а не на привитие знаний в какой – либо конкретной области (математике, родном языке и т. д.), во – вторых, направленное на взрослых людей. Исследования по когнитивному обучению получили существенное развитие лишь в последнее время, когда безработица и сложная технология остро поставили проблему повышения общего уровня интеллектуального развития достаточно значительной части населения развитых стран.

Таким образом, место психологии в системе наук, изучающих проблему «природа – человек», и «человечество – природа», не из последних. Разработка концепции формирования экологического сознания личности и системы экологического воспитания и образования в различных типах учебных заведений Латвии является наиболее важным звеном в системе образования.

Эмоциональность, когнитивность, практичность, активность, принципиальность, сознательность, деятельность «я», деятельность «мы» - параметры доминантного отношения к природе. Наличие этих и других положительных качеств свидетельствует о сформированности экологической культуры у личности.

ЛИТЕРАТУРА

1. Bērziņa I. Ceļā uz ekoloģisko kultūru // Informatīvais biļetens "Vide".- 1991. jūnijs. - R.: LU EC Izglītības apgāds "Vide", 11.- 12. lpp.
2. Образование по вопросам охраны окружающей среды в школах стран членов СЭВ. – М., 1983.- 70 с.
3. Ожегов Ю. П., Никифорова Е.В. Экологический импульс: Проблемы формирования экологической культуры молодежи. – М: Молодая гвардия, 1990.- 271 с.
4. Черноушек М. Психология жизненной среды/ Пер. с чеш. И.И.Попа.- М.: Мысль, 1989.- 174 с.- /Человечество на пороге XXI века/.
5. Шагун Г., Павлов В.И., Рьженков П.Е. Исследование экологического сознания детей и подростков// Психол. журн.- 1994.Т. 15. №1 – с. 41 – 49.
6. Ломов Б.Ф. Вопросы общей, педагогической и инженерной психологии. - М.: Педагогика, 1991. - с. 250 – 251.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НОРМИРОВАНИЯ НОВЫХ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ В ОБЪЕКТАХ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

Б.ЯРИНОВСКИЙ, И.КАНГРО

Резекненская Высшая школа, Атбривошанас алея 76, Резекне LV – 4600

Стремительное развитие химии и энергетики, промышленного производства и расширение масштабов всех отраслей хозяйства, а также урбанизация с широким использованием предметов бытовой химии и

автомобильного транспорта фактически приводят к прогрессивно нарастающему включению в биосферу свыше одного миллиона несвойственных природе химических веществ, а всего во всём мире известно более 4 миллионов химических веществ. Кроме того, получение каждого нового вещества связано с использованием не менее двух полупродуктов или сопутствующих продуктов.

В связи с изложенным возрастает степень риска для здоровья человека и негативного влияния на окружающую среду от применения громадного количества химических веществ. Таким образом, возникает необходимость нормирования новых химических соединений в объектах окружающей среды, определения их токсичности и опасности.

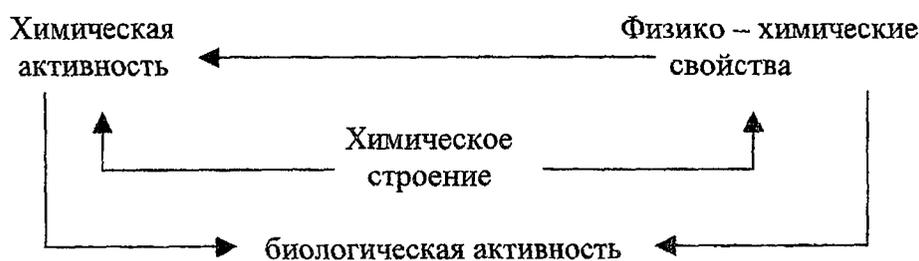
Естественно, провести полную токсикологическую характеристику химического вещества с обоснованием предельно – допустимой концентрации (ПДК) в одной из сред, представляет значительные трудности. Это связано, во – первых, со значительными экономическими затратами и, во – вторых, с длительными сроками проведения такого рода исследований (1,5 – 2 года). Часто такие расходы могут оказаться необоснованными, так как уже на этапах лабораторных работ и опытного производства или применения выясняется нецелесообразность дальнейшего изучения и внедрения данного химического вещества по технологическим производственным показателям. Следовательно, при этом часто отпадает и необходимость продолжения токсиколого – гигиенического изучения конкретного вещества.

Отмеченные обстоятельства и послужили основанием использования сокращённой программы для оценки степени токсичности и опасности химических веществ.

В своих исследованиях мы выбрали метод математического прогнозирования токсичности и обоснования ПДК.

Математические методы определения ориентировочных величин ПДК находят всё большее признание среди специалистов различного профиля.

Используя метод математического моделирования нормирования новых химических соединений за основу была взята схема взаимосвязи между химической структурой и биологической активностью веществ.



Соответственно указанной схеме исследования проводили в следующих основных направлениях установления корреляционных связей между физико – химическими свойствами и биологической активностью, отдельными параметрами токсичности и другими показателями биологической активности.

Для расчёта ПДК веществ в пределах одного гомологического ряда с уже нормированными гомологами использовали зависимость следующего вида:

$$\text{ПДК} / \text{в мг/м}^3 / = \frac{M}{\sum l_i} * 1000, \quad (1)$$

где M – молекулярная масса, а $\sum l_i$ - сумма биологической активности всех связей вещества.

Показатели биологической активности представлены в таблице 1.

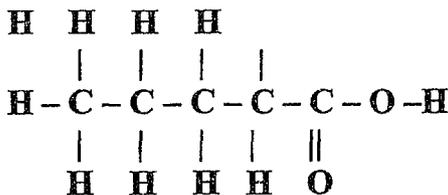
Таблица 1

Значения биологической активности химических связей нормированных соединений различных гомологических рядов

Химические связи	l_i	Ряды соединений
$\equiv \text{C} - \text{H}$	0,8	Предельные, непредельные, циклические, нециклические углеводороды
$\equiv \text{C} - \text{C} \equiv$	51,4	Предельные нециклические углеводороды
$= \text{C} = \text{O}$	- 12 517,8	Предельные альдегиды (у карбонильной группы)
$\equiv \text{C} - \text{O} -$	21 987,7	Нециклические оксиды
$- \text{O} - \text{H}$	8 507,9	Органические кислоты

Расчёты предельно допустимой концентрации химического вещества в воздухе рабочей зоны (ПДК_{р.з.} /, мг/м³), опирающиеся на значения биологической активности химических связей нормируемых соединений, дают достаточно точные результаты и для некоторых соединений не уступают по точности расчетам, основанным на данных токсикометрии.

Пример расчёта ПДК_{р.з.} для валериановой кислоты:



$$\begin{aligned}
 \sum l_i &= 9 \text{ (для } \equiv \text{C} - \text{H}) + 4 \text{ (для } \equiv \text{C} - \text{C} \equiv) + 1 \text{ (для } = \text{C} = \text{O}) + 1 \text{ (для } \equiv \text{C} - \text{O} -) + \\
 &+ 1 \text{ (для } - \text{O} - \text{H}) = 9 * 0,8 + 4 * 51,4 + 1 * (-12517,8) + 1 * 21987,7 + 1 * 8507,9 = 18190,6
 \end{aligned}$$

$$\text{ВДК}_{\text{р.з.}} = \frac{102,0}{18190,6} * 1000 = 5,6 \text{ мг/м}^3$$

Утверждая в законодательном порядке ПДК р.з. валериановой кислоты составляет 5 мг/м³. Имея дело с каким – либо новым вредным веществом, можно, зная некоторые физико – химические свойства, с большей степенью вероятности не только предвидеть характер и силу его токсического действия, но даже прогнозировать ориентировочную величину ПДК в воздухе.

Как известно, существуют достаточно тесные корреляционные связи между биологической активностью и свойствами этих веществ.

Для разнообразных летучих органических соединений сугобо ориентировочные величины ПДК воздуха рабочей зоны можно рассчитать по следующим уравнениям:

$$\lg \text{ПДК}_{\text{р.з.}} = 1,12 - 0,0586 + \lg M \quad (2)$$

$$\lg \text{ПДК}_{\text{р.з.}} = 14,2 - 10 * nД + \lg M \quad (3)$$

$$\lg \text{ПДК}_{\text{р.з.}} = -1,2 - 0,012 * t^{\circ}_{\text{пл.}} + \lg M \quad (4)$$

$$\lg \text{ПДК}_{\text{р.з.}} = 0,40 - 0,01 * M + \lg M \quad (5)$$

$$\lg \text{ПДК}_{\text{р.з.}} = 0,6 - 0,01 * t^{\circ}_{\text{кип.}} + \lg M \quad (6)$$

$$\lg \text{ПДК}_{\text{р.з.}} = 1,6 - 2,2 * d + \lg M \quad (7)$$

Уравнения (2 – 7) рекомендуются при ограничении констант в пределах:

$$M = 30 \div 300; \quad d = 0,6 \div 2;$$

$$t^{\circ}_{\text{кип.}} 100 \div 300, \quad t^{\circ}_{\text{пл.}} = -190 + 180^{\circ};$$

$$nД = 1,3 \div 1,6.$$

Расчёт ПДК_{р.з.} необходимо производить по всем имеющимся константам или не менее, чем по двум. Среднее значение рассчитывается из ПДК и лишь потом берётся антилогарифм.

Результаты математического прогнозирования ориентировочных ПДК в воздухе рабочей зоны по параметрам острой токсичности дают наилучшее приближение расчётных и экспериментально обоснованным ПДК. Наибольшее приближение к экспериментально разработанным ПДК даёт формула:

$$\text{ПДК}_{\text{р.з.}} = 0,01 \text{DL}_{50} \text{ (мг/кг)} \quad (8)$$

Определение ориентировочных величин ПДК в воде водоёмов санитарно – бытового водопользования можно рассчитать, используя формулу:

$$\text{ПДК}_{\text{в}} = 0,61 \lg \text{ПДК}_{\text{р.з.}} - 1,0 \quad (9)$$

Математическое прогнозирование ориентировочных ПДК в воде водоёмов по показателям острой токсичности и некоторым физико – химическим константам дают более приближённые значения ориентировочных значений к ПДК экспериментально обоснованным. Кроме того при изучении корреляционной связи в двухмерных рядах (CL₅₀ – ПДК; LD₅₀ – ПДК; t[°]_{пл.} – ПДК; t[°]_{кип.} – ПДК) выявлена чёткая корреляционная зависимость между ПДК и параметрами физико – химических констант, которые устанавливались по уравнениям:

$$\lg \text{ПДК (мг/л)} = -2,12 + 1,7 \lg \text{CL}_{50} \text{ (мг/л)}; \quad r = + 0,64 \quad (10)$$

$$\lg \text{ПДК (мг/л)} = -4,76 + 1,39 \lg \text{LD}_{50} \text{ (мг/л)}; \quad r = + 0,62 \quad (11)$$

$$\lg \text{ПДК (мг/л)} = -0,45 + 0,007 t^{\circ}_{\text{пл.}}; \quad r = - 0,52 \quad (12)$$

$$\lg \text{ПДК (мг/л)} = 0,95 - 0,01 t^{\circ}_{\text{кип.}}; \quad r = - 0,47 \quad (13)$$

В настоящее время расчётный метод для выявления возможных остаточных вредных веществ в пищевых продуктах применяется лишь для пестицидов.

Временную допустимую концентрацию пестицидов (ВДК) в продуктах питания (в мг/кг) можно рассчитывать по формуле:

$$\text{ВДК}_{\text{пр}} = 0,13 * 10^{-2} \text{LD}_{50} + 0,76 \quad (14)$$

Уравнение 14 имеет достаточно высокий коэффициент корреляции – 0,7.

ВДК пр. для пестицидов разных классов необходимо рассчитывать по регламентирующему показателю ПДК_в. Для фосфоорганических пестицидов используется формула 15, а для хлороорганических пестицидов – формула 16.

$$\text{ВДК}_{\text{пр.}} = 1,45 \text{ ПДК}_{\text{в}} + 0,68 \quad (15)$$

$$\text{ВДК}_{\text{пр.}} = 2,2 \text{ ПДК}_{\text{в}} + 0,33 \quad (16)$$

Расчёт ВДК в почве проводится в основном для пестицидов. Расчёт ВДК_п проводится на основе ПДК соответствующего пестицида в овощах или плодовых культурах по формуле:

$$\text{ВДК}_{\text{п}} = 1,23 + 0,48 \lg \text{ПДК}_{\text{пр}} \quad (17)$$

Расчитанные ориентировочные значения ПДК_{р.з.}, ПДК м.р., ПДК с.с., а также ПДК_в для 108 химических соединений на НПО «Биохимреактив» с использованием интерполяции и экстраполяции в рядах соединений, близких по химической структуре, физико – химическим свойствам и биологическому действию практически совпадали с соответствующими значениями экспериментально обоснованных ориентировочно безопасных уровней воздействия (ОБУВ) или ПДК.

В связи с этим предлагается изучение токсикологических свойств вновь внедряемых препаратов проводить с использованием расчётных методов с обязательным последующим экспериментальным обоснованием токсичности отдельных представителей каждого класса соединений.

Математическое моделирование нормирования новых химических соединений в объектах окружающей среды и продуктах питания можно рекомендовать к использованию при проведении лабораторно – практических работ студентам, обучающихся по специальности «охрана окружающей среды».

ЛИТЕРАТУРА

1. Беспамятов Г.Н., Кротов Ю.А. Предельно допустимые концентрации химических веществ в окружающей среде. Справочник. – Л.: Химия, 1985. – 528 с.
2. Заугольников С.Д., Кочанов М.М., Лойт А.О., Ставчинский И.И. К вопросу прогнозирования ПДК и реальной опасности химических веществ в воде водоёмов // Гигиена труда и охрана здоровья населения. – 1974. – с. 9 – 16.
3. Методы определения токсичности и опасности химических веществ /Токсикометрия/ И.В. Саноцкий. – М.: Медицина, 1970. – с.37 – 46.
4. Шестёркин Б.А., Гредин В.Г., Замах В.П. Методологические подходы к изучению токсичности биохимических реактивов и препаратов, выпускаемых НПО «Биохимреактив» // Методы получения и анализа биохимических препаратов / Тезисы докладов 1У Всесоюзной конференции / НИИТЕХИМ / ВНИИ прикладной биохимии. – Рига, 1982. – с.45 – 46.
5. Экспрессные методы определения токсичности и опасности химических веществ / С.Д. Заугольников, М.М. Кочанов, Л.О. Лойт, И.И. Ставчинский. – Л.: Медицина, Ленинградское отделение. – 1978. – с. 17 – 42.
6. Израйлет Л.И., Шестёркин Б.А., Странч Т.И. Сравнительная токсичность аминокислот и их производных // Гигиена и профзаболевания / Сб. науч. статей РМИ. – Рига, 1980. – С. 57 – 59.