

**Оценка опасности химических веществ для окружающей среды на основе значений коэффициента распределения «н-октанол/вода»**

**Научный руководитель – Макарова Анна Сергеевна**

***Пищаева Ксения Витальевна***

*Студент (бакалавр)*

Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Институт химии и проблем устойчивого развития (ИПУР), Кафедра ЮНЕСКО "Зелёная химия для устойчивого развития Новомосковск, Россия

*E-mail: hurts.ivanova@yandex.ru*

В настоящее время для того, чтобы оценить опасность химического вещества для окружающей среды необходимо располагать большим количеством данных, таких как: среднесмертельная концентрация для различных видов гидробионтов (рыбы, водоросли, дафнии), максимальная недеятельная доза, коэффициент биоконцентрации и др. [1,3], также данные по этим показателям используются и при расчете класса опасности отхода. Однако найти эти данные в различных справочных системах бывает затруднительно, поскольку испытания проводились только для небольшого процента химических веществ. Таким образом возникает необходимость в расчете этих показателей на основе структуры вещества.

При применении расчетной методологии базовым показателем является коэффициент «н-октанол/вода», поскольку с использованием данного коэффициента можно вычислить показатели острой и хронической токсичности химического вещества для гидробионтов, а также коэффициент биоконцентрации химических веществ, характеризующего способность химических веществ накапливаться в живых организмах и в итоге приводить к отрицательному воздействию на организм, даже при низких концентрациях химического вещества в объектах окружающей среды. Однако расчетные методы определения коэффициента распределения «н-октанол/вода» не могут полностью заменить экспериментальную оценку опасности вещества, особенно при определении сенсibiliзирующего, канцерогенного, мутагенного действия и др. [2]. Расчетная оценка показателей на основании математических моделей рассматривается как первый этап оценки свойств химических веществ, определяющих их воздействие на окружающую среду.

Ныне результаты экспериментального определения коэффициентов распределения «н-октанол/вода» сравниваются со значениями полученными расчетным методом, погрешность составляет до 30%. Данная погрешность может быть как следствием несовершенства математическим методом применяемого для расчета коэффициента «н-октанол/вода», так несовершенством условий проведения эксперимента.

### **Источники и литература**

- 1) ГОСТ 32424-2013. Классификация опасности химической продукции по воздействию на окружающую среду. Основные положения. – Введ. 2014-08-01. – М.: Стандартинформ, 2014 – 16 с.
- 2) Смирнов В.Г., Маймулов В.Г., Нечипоренко С.П. и др. Расчетные методы оценки опасности и гигиенического нормирования вредных веществ в разных средах. М., 2002 – 130 с.
- 3) Тарасова Н.П., Макарова А.С. Сравнительный анализ систем управления обращением химикатов // Известия Академии наук. Серия химическая. 2013. № 7. С. 1682.