

УДК 658.382

РАСЧЕТ СРЕДНЕСУТОЧНЫХ ВРЕМЕННЫХ ДОПУСТИМЫХ КОНЦЕНТРАЦИЙ ПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗОЛА

© В.И. Вигдорович

V.I. Vigdorovich. *Calculations of daily average temporary concentrations of benzene derivatives.* The research proposes a method to calculate daily average temporarily-permissible concentrations of benzene derivatives containing as substitutes alkyl and oxyalkyl radicals of normal and iso-constitution.

Экологическая ситуация в конкретном регионе, обусловливаемая абиотическими факторами, в стационарных условиях определяется наличием некоторой суммы загрязнителей, совместно присутствующих в атмосфере, гидро- и литосферах. Причем, естественно, в разных фазах биосферы это, как правило, различные взаимовлияющие поллютанты.

В условиях залповых выбросов ситуация существенно меняется, т.к. уровень экологической опасности становится функцией одного загрязнителя, определяясь катастрофическим превышением его фактической концентрации над фоновой или предельно-допустимой в той или иной фазе биосферы (например, залповый выброс COCl_2 в Тамбове в июне 1995 года). Для оценки экологической опасности в таком случае, правда, несколько упрощая картину, целесообразно пользоваться коэффициентом превышения ρ_i , равным

$$\rho_1 = C_{\text{факт}}/\text{ПДК}_{\text{с.с.}}, \text{ либо } \rho_2 = C_{\text{факт}}/\text{ПДК}_{\text{м.р.}},$$

где $\text{ПДК}_{\text{с.с.}}$ и $\text{ПДК}_{\text{м.р.}}$ - соответственно среднесуточная и максимально разовая предельно-допустимые концентрации. Вместе с тем предельно-допустимые величины нельзя считать биологическими константами [1]. Это доказывается, в частности, тем, что в разных странах утверждены различные величины ПДК_i . В качестве примера для ПДК рабочей зоны некоторые подобные данные приведены в табл. 1.

Такая ситуация обусловлена тем, что в разных странах, при проведении вынужденной корреляции между испытываемыми животными и человеком, используют различный коэффициент запаса оценки $\text{ПДК}_{\text{р.з.}}$. Дело в том, что оценка токсичности веществ проводится на животных (мыши, крысы, кролики, морские свинки), а аппроксимируются результаты на человека.

Несколько ближе в случае различных веществ друг к другу величины $\text{ПДК}_{\text{с.с.}}$. Однако, как $\text{ПДК}_{\text{р.з.}}$, так и тем более $\text{ПДК}_{\text{с.с.}}$, известны для весьма ограниченного круга веществ. В связи с этим используются различные методики расчета временных допустимых концентраций $\text{ВДК}_{\text{р.з.}}$ по эмпирическим уравнениям, включающим ограниченное число экспериментальных величин (LK_{50} , LD_{50}), либо с использованием некоторых условных величин биологической активности химической связи, прежде всего, органических веществ, если известна их молекулярная формула и строение, а воздействие носит

общетоксический характер. С этой целью предложена достаточно простая формула [2], не требующая вообще знания экспериментальных данных по токсичности веществ. Она имеет вид

$$\text{ВДК}_{\text{р.з.},i} = \frac{1000M_i}{\sum J_{i,k}} \quad [2] \quad (1)$$

где M_i и $\text{ВДК}_{\text{р.з.},i}$ - соответственно молярная масса, г/моль и временная допустимая концентрация, мг/м³, i -го вещества в рабочей зоне. $J_{i,k}$ - биологическая активность k -той связи в i -том веществе. Размерность ее г·м³/моль·мг носит формальный характер.

Однако использование предложенного метода встречает ряд трудностей. В частности, во-первых, отсутствуют данные по биологической активности

Таблица 1.

Предельно-допустимые концентрации в воздухе рабочей зоны ряда загрязнителей, принятые в качестве критериальных величин в ряде стран

ПДК _{р.з.} , мг/м ³	Коэффициенты кратности к наименьшему значению ПДК _{р.з.}	Страна
		NO ₂
0,085	1,0	Бывший СССР, Югославия, Болгария
0,300	3,5	ФРГ, Румыния, бывшая Чехословакия
0,410	4,8	Канада
0,560	6,6	Финляндия
		NO _x
0,100	1,0	Бывшая ГДР
0,450	4,5	Испания
0,600	6,0	Италия
2,000	20,0	ФРГ
		H ₂ S
0,008	1,0	Бывший СССР, Болгария, Венгрия, бывшая Чехословакия
0,010	1,2	Испания
0,016	2,0	Бывшая ГДР
0,030	3,8	Румыния
0,100	12,9	Италия
0,150	19,0	Финляндия
0,300	37,5	Венгрия

химической связи ($C_{---}C$) в бензольном кольце. Вторых, ПДК_{р.з.} для веществ одного гомологического ряда часто многократно различаются, например, ПДК_{р.з.} (C_6H_6) = 5 мг/м³, ПДК_{р.з.} ($C_6H_5CH_3$) = 50 мг/м³, что совершенно не находит отражения в расчетах по уравнению (1) и более того делает подобные расчеты бессмысленными. Несколько лучше ситуация в случае сопоставления величин ПДК_{с.с.}, но и здесь необходимо использовать корреляционные коэффициенты.

Очевидно, что экспериментально получаемые полуэмпирические величины ПДК_i и рассчитанные на основе тех или иных эмпирических уравнений ВДК_i должны быть достаточно близкими, либо, учитывая, что ПДК_i ближе к истине, чем ВДК_i, последние необходимо ужесточать в соответствии с неравенством

$$ПДК_i > ВДК_i.$$

Величину условной биологической активности $C_{---}C$ - связи бензольного ядра целесообразно оценить, исходя из известной величины ПДК_{с.с.} (C_6H_6), равной 0,03 мг/м³. Тогда соответствующую величину $J(C_{---}C)$ можно будет использовать в дальнейших расчетах ВДК_{с.с.} соединений, в молекуле которых находится одно или несколько бензольных ядер. Однако и зависимость (1) нуждается в уточнении, которое позволило бы использовать ее для расчетов временных критериальных величин членов гомологического ряда, различающихся классом опасности. С учетом сказанного уравнение (1) целесообразно дополнить соответствующим коэффициентом. Тогда оно принимает вид

$$ВДК_{с.с.,i} = \frac{1000M_i K_{кор}}{\sum J_{i,k}} \quad (2)$$

Коэффициент корреляции $K_{кор}$ определяется классом опасности рассматриваемых веществ.

Класс опасности вещества	1	2	3	4
$K_{кор}$	0,05	0,2	5	7

Такой подход позволяет получить вполне разумные значения ВДК_{с.с.} не только ближайших гомологов бензола, но и простейших представителей других классов ароматических соединений. При этом $J(C_{---}C)$ связи бензольного ядра первоначально оценивается с использованием уравнения (1) в предположении выполнимости равенства

ПДК_{с.с.} (C_6H_6) = ВДК_{с.с.} (C_6H_6).

Расчет по (2) с $K_{кор} = 1$ приводит к величине $J(C_{---}C)$, равной 433333. Т.к. $J(C_{---}C) \gg J_i$ других связей в ароматических соединениях, имеющих в качестве заместителей в бензольном ядре алкильные или оксиалкильные радикалы нормального и изостроения, то уравнение (2) для таких соединений упрощается

$$ВДК_{с.с.,i} = \frac{1000M_i K_{кор}}{6J(C_{---}C)} \quad (3)$$

Рассчитанные с использованием уравнения (3) ВДК_{с.с.} ряда индивидуальных химических соединений различных классов ароматического ряда приведены в табл. 2.

Таблица 2.

ПДК_{с.с.} и рассчитанные с использованием уравнения (3) ВДК_{с.с.} ряда химических соединений

Соединение	Молекулярная формула	Класс опасности	ПДК _{с.с.} , мг/м ³ [3]	ВДК _{с.с.} , мг/м ³
Толуол	$C_6H_5CH_3$	3	0,2	0,18
Изомеры ксилола	$C_6H_4(CH_3)_2$	3	0,6	0,20
Этилбензол	$C_6H_5C_2H_5$	3	0,2	0,20
Фенол	C_6H_5OH	2	0,01	0,007
Бензиловый спирт	$C_6H_5CH_2OH$	4	0,16*	0,29

*ПДК_{м.р.}, которая по [2] для многих соединений совпадает с ПДК_{с.с.}, в других случаях близка к ней.

ЛИТЕРАТУРА

1. Вигдорович В.И., Цыганкова Л.Е. Химия и экология Тамбова. Тамбов: Изд-во «Пролетарский светоч», 1996. С. 5-21.
2. Беспямятников Г.П., Кротов Ю.А. Предельно-допустимые концентрации химических веществ в окружающей среде. Л.: Химия, 1985. 528 с.
3. Исидоров В.А. Органическая химия атмосферы. Л.: Химия, 1985. 265 с.

Поступила в редакцию 25 декабря 1997 г.