



Экологическая химия 2019, 28(1); 29–35.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ИОНОВ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ ТОКСИЧНОСТИ ИОНОВ МЕТАЛЛОВ

Г. Т. Фрумин^{а,б}

^а *Российский государственный гидрометеорологический университет,
ул. Воронежская 79, Санкт-Петербург, 192007 Россия*

^б *Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена,
наб. р. Мойки 48, Санкт-Петербург, 191186 Россия
e-mail: gfrumin@mail.ru*

Поступило в редакцию 10 декабря 2018 г.

В работе приведены математические модели, связывающие средние летальные концентрации катионов металлов для дафний и нематод с их физико-химическими показателями (дескрипторами). Установлено, что наиболее информативными дескрипторами, количественно связанными с токсичностью катионов металлов для *Daphnia magna* и *Caenorhabditis elegans*, являются отрицательные логарифмы первых констант гидролиза, отрицательные логарифмы произведения растворимости сульфидов и константы устойчивости комплексов металлов с этилендиамином. Полученные на основе эмпирических данных уравнения линейной регрессии между средними летальными концентрациями ионов металлов для *Daphnia magna* и *Caenorhabditis elegans* могут использоваться в качестве прогностических зависимостей, так как обладают существенной предсказательной способностью.

Ключевые слова: токсичность, катионы металлов, дафнии, нематоды, математические модели, прогнозирование

ВВЕДЕНИЕ

На сегодняшний день, по данным “Chemical Abstracts”, общее число известных химических соединений перевалило уже за 20 млн. Во всех лабораториях нашей планеты ежедневно синтезируется 200–250 новых химических соединений. Количество же теоретически возможных небольших (мономерных) органических молекул, согласно “Chemical Information Systems”, достигает астрономической величины – 10^{68} ! [1]. Из общего числа известных химических

веществ и соединений около 60 тыс. находят широкое применение в деятельности человека, в том числе более 500 из них относят к группе опасных химических веществ (ОХВ).

Среди приоритетных химических веществ, загрязняющих биосферу, особое место занимают металлы [2–7]. Это обусловлено следующими причинами.

(1) Скорость извлечения металлов из земной коры человеком выше, чем геологическая скорость их извлечения.