

НОВЫЕ МЕТОДИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ОЦЕНКИ БИОЛОГИЧЕСКОЙ ОПАСНОСТИ **РАЗЛИВОВ НЕФТИ**

Обосновывается необходимость оценки токсичности индивидуальных углеводородов. Для этих целей предлагаются информационные технологии, включая расчеты биологической активности по химической структуре вещества, и дается оценка их применения к реальным ситуациям на некоторых примерах.

Введение

С химической точки зрения нефть представляет собой сложную смесь органических соединений, основную часть которых составляют углеводороды (**УВ**) различных химических классов. По современным данным в нефти может присутствовать более 2000 индивидуальных УВ. В ее состав также входят гетероатомные соединения, некоторые металлы, среди которых доминирующими чаще всего являются ванадий и никель, естественные радионуклиды (уран, торий и члены их радиоактивных семейств, в том числе радий), а также другие химические элементы [1].

Функционирование нефтяной индустрии (добыча, транспортировка, хранение, переработка) часто сопровождается попаданием нефти в окружающую среду. Нефтяные разливы, связанные с авариями танкеров, магистральных трубопроводов, морских платформ и т.д., достаточно хорошо известны [2], поэтому ограничимся только одним примером, который демонстрирует изменение числа порывов (протечек) нефтепроводов в России в зависимости от добычи нефти (рис. 1).

После попадания в воду нефть перестает существовать как смесь компонентов – с ней происходят разнообразные химические, физико-химические, а также метаболические превращения, осуществляемые (в последнем случае) гидробиотой [4]. В числе таких превращений:

- ◆ фракционирование нефти в воде по плотности и гидрофобности;
- ◆ образование поверхностных пятен (сликов);
- ◆ испарение;

- ◆ осаждение;
- ◆ растворение;
- ◆ эмульсификация («нефть в воде», «вода в нефти»);
- ◆ адсорбция взвешенными частицами и донными отложениями;
- ◆ образование комплексов с металлами;
- ◆ каталитическая деструкция;
- ◆ фотохимические превращения;
- ◆ полимеризация;
- ◆ окисление;
- ◆ микробиологическая трансформация;
- ◆ макробиологическая трансформация.

Г.М. Баренбойм*,

доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник, ФГБУН Институт водных проблем Российской академии наук

А.Ю. Савека,

аспирант, младший научный сотрудник, ФГБУН Институт водных проблем Российской академии наук

В.Д. Рябов,

доктор химических наук, профессор, ФГБОУ ВПО Российский государственный университет нефти и газа им. И.М. Губкина

В результате таких превращений разлитая в воде нефть представлена различными сочетаниями индивидуальных УВ – как исходными (первичными), так и продуктами их превращений (вторичными) на разных вертикальных уровнях водного объекта и в донных отложениях (**ДО**).

В пробах воды или ДО через некоторое время после разлива нефти обычно содержится не более 20-30 исходных УВ (иногда не более 5) [5].

При распространении УВ разлитой нефти по водному объекту (например, по течению реки) состав этих сочетаний изменяется качественно и количественно [5].

Загрязнение вод нефтью или нефтепродуктами делает их токсичными. Поведение нефти в воде свидетельствует о том, что токсичность вод на различных участках водных объектов по горизонтали и вертикали различная и определяется конкретными УВ на каждом таком участке. Тем не менее, во многих странах, включая Россию, безопасный уровень официально определяется нормативной величиной предельно допустимой концентрации (**ПДК**) для фиксированной совокупности УВ в нефти.

В России величина ПДК представлена так называемой «ПДК для нефтепродуктов», под которыми понимаются гидрофобные УВ, способные растворяться в определенных

* Адрес для корреспонденции: gbarenboim@gmail.com

органических растворителях, в данном случае в гексане. Очевидно, что это норматив, относящийся к определенной группе УВ в целом. В нем не учитывается специфическая для всех индивидуальных УВ токсичность и тот факт, что состав исходной нефти варьируется по составу УВ, а также то, что нефть как смесь УВ и входящие в ее состав УВ подвержены превращениям в водной среде, которые рассмотрены выше.

Аналогичные по смысловому содержанию значения ПДК существуют для промышленных видов нефтепродуктов, например, бензина, керосина технического, тракторного и т.д. Тем не менее, все нормативы, касающиеся пределов содержания смеси УВ, не учитывают опасность индивидуальных соединений, которые из исходной смеси определенным образом распределяются и трансформируются в окружающей среде в зависимости от ее особенностей.

Исходя из сказанного выше, при разливах нефти и нефтепродуктов представляется целесообразным производить оценку опасности индивидуальных как первичных, так и вторичных УВ.

ПДК для отдельных УВ нормируется, но количество таких нормированных соединений невелико (в России не более 50), если учесть, что нефть содержит более 2000 УВ, а их трансформация в воде увеличивает это количество.

В США Агентством по охране окружающей среды (US EPA) в питьевой воде нормируется содержание для 5 УВ. По данным Agency for Toxic Substances and Disease Registry (ATSDR) сведения о токсичности даны для 95 УВ (в нефти и нефтепродуктах). Для раз-

работки критерия токсичности был определен перечень из 25 УВ; для 12 из них рассчитаны MRL (minimal risk level) [6].

Следует отметить, что часто ПДК для индивидуальных соединений принимают более низкие значения, чем ПДК для смеси УВ. Например, предельно допустимое содержание (MCL или maximum contaminant level) бенз[а]пирена в питьевой воде по данным US EPA составляет 0,0002 мг/л, в то время как его концентрация в нефти может значительно превышать ПДК [7].

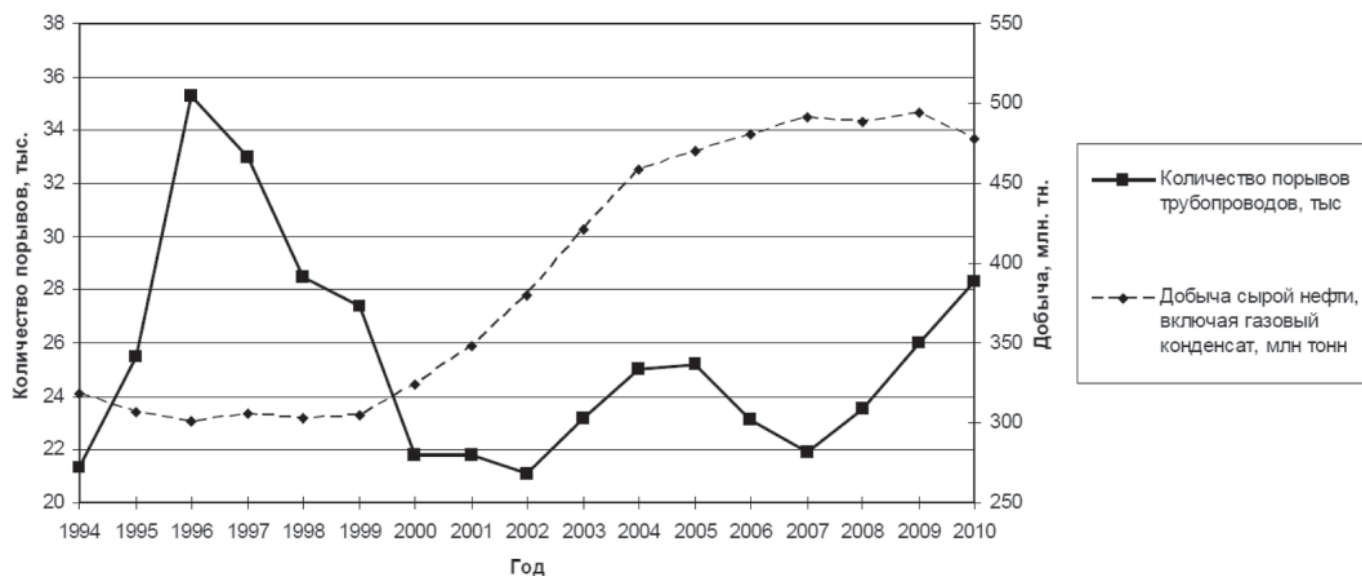
Очевидно, что концентрационные и дозовые характеристики, которые соответствуют безопасному уровню воздействия индивидуальных УВ на живые организмы, представлены только для ограниченного количества УВ. Для вторичных продуктов физико-химических, химических и метаболических превращений УВ они практически полностью отсутствуют.

Определение ПДК для всех УВ нефти и даже только для ее доминантных компонентов – задача трудоемкая и затратная, а с учетом их производных – практически неразрешимая. В связи с этим оказалось целесообразным рассмотреть возможность расчетного прогнозирования на основе знания структуры УВ всей совокупности (спектра) видов биологической активности (БА), которой обладает каждый индивидуальный УВ.

Такой подход позволяет классифицировать УВ нефти и нефтепродуктов, а также продукты их деструкции по видам БА, выделяя, например, мутагены, канцерогены, гепатотоксины и т.д. Это позволяет более реально оценивать биологическую опасность разлива и экологические риски даже в условиях отсутствия сведений о ПДК.

Таким образом, цель данной работы связана с прогнозированием спектра БА индивиду-

Рис. 1. Количество порывов трубопроводов и объемы добычи нефти [3].



альных УВ. Расчетные методы определения порога опасных концентраций, а также интегральные риски, обусловленные наличием в конкретной водной зоне определенного сочетания первичных и вторичных УВ, пока не рассматриваются.

Материалы и методы исследования

В настоящее время для оценки БА химических соединений существуют различные расчетные методы, которым посвящена весьма обширная литература и среди которых своей эффективностью по отношению к прогнозу видов биологической активности выделяется группа методов, основанных на:

- а) квантово-химических расчетах;
- б) использовании эмпирических моделей;
- в) делении структуры молекулы на дескрипторы, записываемые определенным кодом;

формировании обучающей выборки из молекул с известными видами БА, структуры которых также записаны в дескрипторном виде;

применении математической статистики для определения БА анализируемой молекулы по обучающей выборке.

Последняя из названных групп методов оказалась наиболее эффективной при определении БА разнообразных классов веществ [8-11], но никогда не применялась для анализа нефтегенных УВ применительно к их токсичности.

Названный выше подход на основе обучающей выборки принципиально возможен благодаря тому, что современные аналитические методы, в первую очередь хромато-масс-спектрометрические, дают возможность установить химическую структуру нефтегенных УВ и определить их содержание.

В данной работе был применен метод анализа взаимосвязей «структура-активность» с использованием обучающей выборки, реализованный в компьютерной программе PASS, которая разработана в Институте биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича РАМН для фармакологических целей [8].

Версия программы PASS 10.1 прогнозирует более 4000 видов БА со средней точностью свыше 95 % (инвариантная точность прогноза при скользящем контроле с исключением по одному). Ее обучающая выборка содержит информацию о более чем 250000 биологически активных соединений, включая данные о некоторых химических токсикантах [12].

Входным параметром для компьютерной программы является структурная формула соединения, представленная в соответствующем

Ключевые слова:

разливы нефти, углеводороды нефти, биологическая активность, охрана водных объектов, загрязнение донных отложений, индивидуальная токсичность углеводородов, расчеты «структура-активность»

формате (формат файла .mol*, .sd*). Результаты прогноза для каждого вида БА включают в себя его название и оценки вероятностей ее наличия (P_a) и отсутствия (P_i). Чем больше для конкретной активности величина P_a и чем меньше величина P_i , тем больше шанс обнаружить данную активность в эксперименте.

В работе [12] содержится подробное описание основных принципов работы и характеристик программы PASS.

Программа PASS была разработана для фармакологических целей, однако показала свою эффективность при оценке БА различных ксенобиотиков, загрязняющих воду, в работах, проводимых в ИВП РАН совместно с МГУП «Мосводоканал» [13].

Помимо оценки БА по химической структуре расчетными методами в некоторых случаях дополнительную информацию о БА соответствующих УВ можно получить из международных баз данных, таких, например, как «Краткие международные документы по оценке химических веществ» (Concise International Chemical Assessment Documents – CICADs) и др.

Информационные технологии, включая поиск информации о токсичности индивидуальных УВ по базам данных и расчетные методы анализа взаимосвязей «структура-активность» (PASS), были объединены в единую систему, получившую название «Поисковая и расчетная информационная система», которая описана в работе [13].

Схема функционального алгоритма такой системы представлена в работах [13, 14].

Результаты и их обсуждение

Дополнительное тестирование надежности расчетного блока этой системы применительно к нефтегенным УВ было проведено путем расчетов токсической активности ряда УВ и сравнением этих данных с результатами информационного поиска экспериментальных данных.

В *табл. 1* представлены результаты сравнения экспериментальных и расчетных БА на примере *n*-гексана [15].

Высокая степень совпадения экспериментальных и расчетных видов БА демонстрирует достоверность расчетов, которые применяются при оценке токсичности индивидуальных УВ. Аналогичные результаты были получены при сравнении расчетных и экспериментальных данных применительно к токсичности толуола [15].

Такой подход позволяет производить прогнозную оценку опасности соединений, для

Таблица 1

Сравнительные результаты приложения экспериментальных и расчетных методов к определению токсической биоактивности н-гексана (при $P_a > 0,5$)

Экспериментальная биоактивность и информационные источники данных	Виды расчетной биоактивности и вероятность их появления
Нейротоксикант (эксперимент на крысах) [16]	0,752 Нейротоксикант
Конвульсант (эксперимент на крысах) [17]	0,629 Конвульсант
Депрессант (при оральном пути поступления) [18]	0,701 Депрессант
Гепатотоксикант (эксперимент на самках крыс) [17]	0,552 Гепатотоксикант
Нейротоксикант (сенсомоторная полинейропатия при длительном воздействии) [18, 19]	0,752 Нейротоксикант
Раздражение глаз (среднее; эксперимент на кроликах) [18]	0,605 Раздражение глаз (среднее)
Раздражение кожи (сильное; дерматит) [18]	0,588 Раздражение кожи (сильное)

Таблица 2

Результаты расчета биологической активности некоторых нефтяных углеводородов, для которых нет данных об их токсических свойствах (при $P_a > 0,4$)

Вещество	Канцероген	Тератоген	Нейротоксикант	Нефро-токсикант	Гепатотоксикант	Депрессия ЦНС
Бицикло [3,3,1]нонан	–*	–	+	+	+	+
транс-Бицикло[4,4,0]декан	+	+	+	+	+	+
3,3,7-триметил-1,2,3,4-тетрагидрохризен	–	–	+	–	–	+
3,8-диметил-5-изопропилнафталин	–	–	+	+	+	+

* Знак «–» означает отсутствие данной активности при $P_a > 0,4$.

которых в литературе имеется недостаточно экспериментальных данных или такие данные полностью отсутствуют. В качестве иллюстративного примера в *табл. 2* приводится перечень УВ, мало изученных в плане токсичности (названы только некоторые виды БА из общего спектра выявленных активностей).

Информационные технологии можно применять для прогноза БА продуктов химического превращения первичных УВ: например, расчеты показали изменение БА при деструкции бензола в воде.

Известно, что бензол в воде может трансформироваться в фенол, катехол и гидрохинон [20]. Применение расчетной технологии показало, что у всех этих веществ присутствует ряд видов БА, характерных для бензола, но по сравнению с бензолом у трансформантов появляется группа новых видов БА (*рис. 2*).

Продукты метаболизма некоторых нефтяных УВ в живом организме также описаны в литературе. В частности, описаны продукты превращений бензола [21], которые поддаются расчету «структура-активность»,

демонстрирующему изменение их БА. На *рис. 3* приводятся результаты расчетов БА метаболитов гидрохинона.

Таким образом, в некоторых случаях можно проследить всю последовательность изменения токсичности первичных, вторичных и последующих продуктов превращения некоторых УВ – от ее изменений в воде до изменений в организме включительно.

Для иллюстрации возможности оценки опасных видов БА УВ при их обнаружении в водных объектах приведем несколько примеров.

В *табл. 3* представлены результаты расчета БА некоторых УВ, обнаруженных в Ивановском, Истринском Чебоксарском водохранилищах Волжского бассейна и в зоне забора воды, направляемой на подготовку питьевой воды, для которых в отечественных нормативных документах отсутствуют значения ПДК [22].

Для перечисленных выше водных объектов не отмечалось случаев заметных разливов нефти – УВ попадают в такие водные объек-

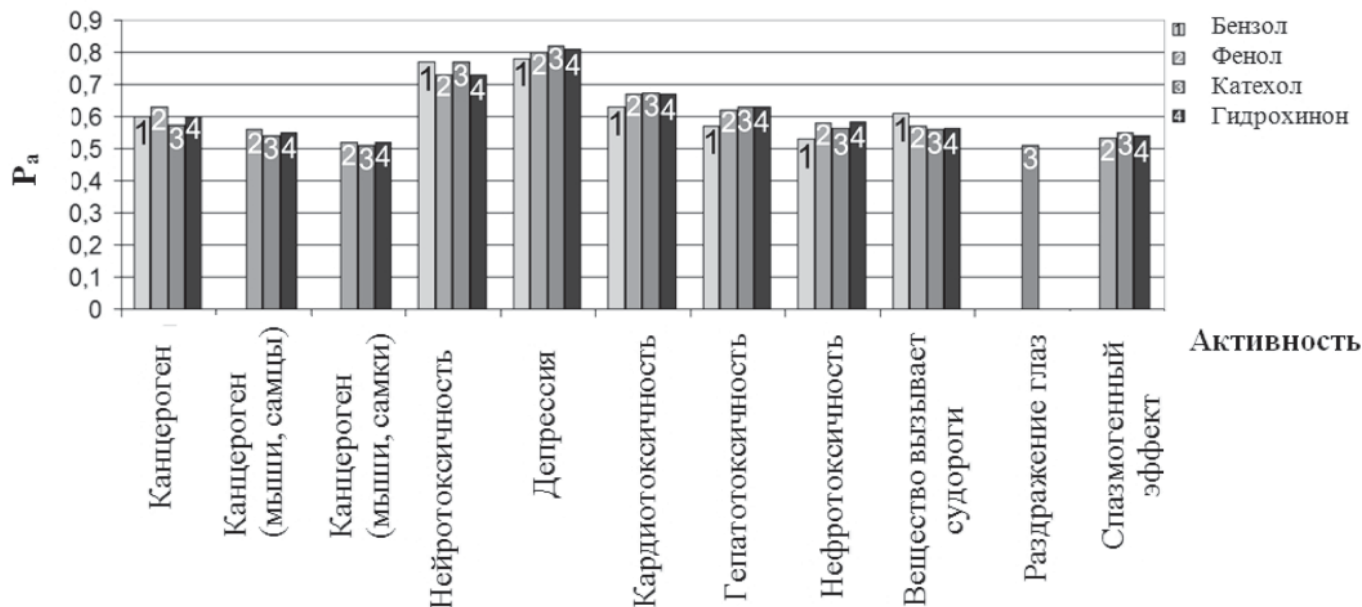


Рис. 2. Прогнозируемые спектры биологической активности бензола и веществ, образующихся в результате его деградации в воде.

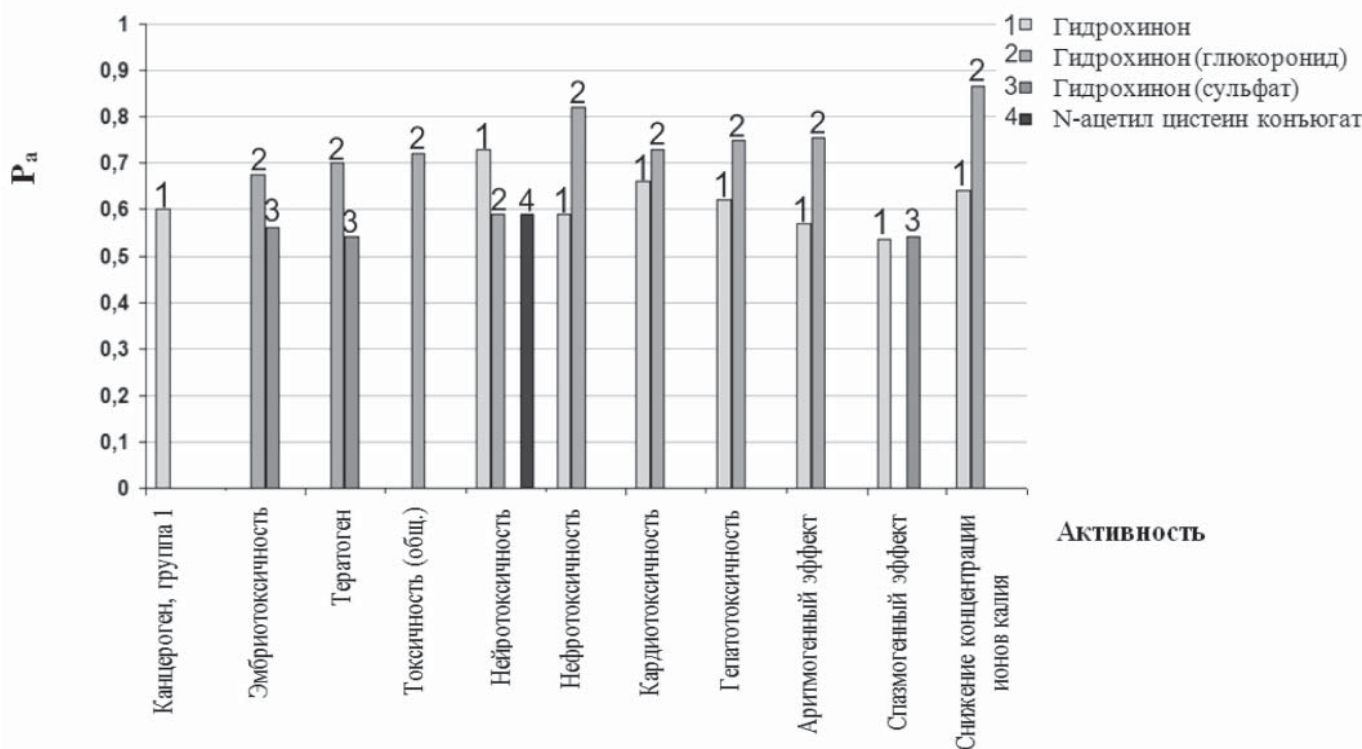


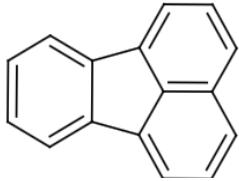
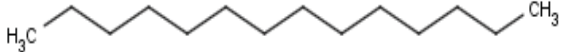
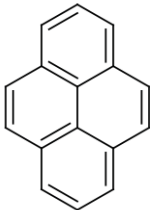

Рис. 3. Прогнозируемые спектры биологической активности гидрохинона и веществ, образующихся в результате его метаболизма в организме человека

ты чаще всего как загрязнение от промышленных нефтепродуктов, хотя не исключены и природные выходы отдельных УВ в воду. В качестве крупного источника загрязнения УВ нефтяного типа для изучения опасности по отношению к биоте и человеку были проанализированы соединения, которые могут входить в состав нефтяных или так

называемых битуминозных песков, из которых в ряде стран, в частности в Канаде, уже ведется добыча углеводородного топлива. Известно, что битумы представляют собой твердые, вязкопластичные или жидкие продукты переработки нефти, в состав которых могут также входить полициклические ароматические углеводороды (ПАУ), некоторые нафтены и алканы [23]. Ежедневно в процессах добычи нефти из канадских битуминозных песков образуется порядка 480 млн. галлонов (около 2 млн.

Таблица 3

Результаты расчета биологической токсической активности некоторых углеводородов, для которых отсутствуют российские нормативы ПДК (при $P_a > 0,5$)

№	Название соединения*	Виды расчетной токсичности и вероятность их проявления (P_a)
1	2	3
1.	<p>Флуорантен</p> 	<p>0,771 Канцероген, группа 1 0,770 Канцероген, группа 2A 0,723 Нейротоксичность 0,674 Депрессия 0,596 Канцероген, группа 3 0,554 Кардиотоксичность 0,552 Вещество вызывает рвоту 0,548 Канцероген, группа 2B 0,532 Вещество вызывает судороги 0,520 Канцероген (мышы, самцы) 0,520 Канцероген (мышы)</p>
2.	<p>Тетрадекан</p> 	<p>0,767 Вещество вызывает рвоту 0,752 Нейротоксичность 0,701 Депрессия 0,629 Вещество вызывает судороги 0,605 Раздражение глаз (среднее) 0,591 Кардиотоксичность 0,552 Гепатотоксичность 0,525 Нефротоксичность</p>
3.	<p>Пирен</p> 	<p>0,751 Нейротоксичность 0,716 Канцероген, группа 1 0,715 Канцероген, группа 2A 0,688 Депрессия 0,567 Вещество вызывает рвоту 0,554 Кардиотоксичность 0,546 Вещество вызывает судороги 0,526 Канцероген, группа 3</p>
4.	<p>н-Генейкозан</p> 	<p>0,767 Вещество вызывает рвоту 0,752 Нейротоксичность 0,701 Депрессия 0,629 Вещество вызывает судороги 0,605 Раздражение глаз (среднее) 0,595 Раздражение глаз (слабое) 0,591 Кардиотоксичность 0,588 Раздражение глаз (сильное) 0,563 Вещество вызывает галлюцинации 0,552 Гепатотоксичность</p>

* Обнаружены вещества: флуорантен и пирен в Ивановском вдхр. (ДО); тетрадекан в Истринском вдхр. (снег), Ивановском вдхр. (снег), Чебоксарском вдхр. (ДО); генейкозан в Чебоксарском вдхр. (вода).

тонн) токсичных вод и отходов, сбрасываемых в специальные хранилища [24]. Сбрасываемые воды содержат большое количество ПАУ, нафтеновых кислот, металлов, их солей, комплексов и т.д. [25]. Было показано [26], что в водных объектах, расположенных в зоне добычи нефти из битуминозных песков, у рыб встречались рак печени, катаракты, опухоли на чешуе и в печени, ослабление иммунной системы;

кроме того, в этой работе приведен перечень ПАУ, обнаруженных в ДО исследованных водных объектов. Учитывая эти обстоятельства, нами были проведены расчеты БА по химической структуре некоторых соединений, обнаруженных в составе битуминозных песков, а также в ДО р. Атабаска (ниже разработки месторождений) [23]. Согласно этим расчетам (табл. 4.), некоторые из соединений могут обладать мутагенным, канцерогенным, гепатотоксическим и др. видами действия на организм, что подтверждает наличие токсических факторов,

Таблица 4

Результаты расчета биологической активности некоторых нефтенных УВ, обнаруженных в составе битуминозных песков Канады и в ДО р. Атабаска (при $P_a > 0,5$)

Виды расчетной активности	Вероятность проявления расчетной активности			
	Битуминозные пески		ДО	
	Метилдибензотиофен	Метилфенантрен	Фенантрен	Дибензо[а, h]антрацен
Канцероген, группа 1	Отсутствует при $P_a > 0,5$	Отсутствует при $P_a > 0,5$	0,716	Отсутствует при $P_a > 0,5$
Канцероген, группа 2А	То же	То же	0,715	То же
Канцероген, группа 3	То же	0,640	Отсутствует при $P_a > 0,5$	То же
Нейротоксичность	0,644	0,618	0,751	0,752
Депрессия	Отсутствует при $P_a > 0,5$	0,624	0,688	0,701
Кардиотоксичность	То же	0,526	0,554	0,591
Гепатотоксичность	То же	Отсутствует при $P_a > 0,5$	Отсутствует при $P_a > 0,5$	0,552
Нефротоксичность	То же	То же	То же	Отсутствует при $P_a > 0,5$
Вещество вызывает судороги	То же	То же	0,546	0,629
Вещество вызывает рвоту	То же	0,523	0,567	0,767

вызывающих некоторые эффекты, обнаруженные в организме рыб и названные выше. Прямые доказательства связи названных выше негативных эффектов с видами токсичности битумных УВ отсутствуют, однако можно предположить, что расчет спектров БА всех УВ, входящих в доминирующую группу, способен выявить те токсичные виды БА, которые будут коррелировать с этими эффектами.

Еще одну опасную для биоты группу веществ представляют нафтеновые кислоты (НК), которые являются естественными компонентами битумов (найжены в отложениях битуминозных песков) [26]. НК обладают растворимостью в воде и обладают устойчивостью к биодegradации в водной среде [23]. В процессе добычи нефти из песков НК концентрируются в шламохранилищах и могут попасть в них в окружающую среду. В естественных условиях НК могут попасть в поверхностные воды в результате смешивания с грунтовыми водами или в результате процессов эрозии в зоне отложений песков.

Поскольку пески содержат сотни видов данных соединений [23], в настоящий момент до конца не ясно, какие из них наиболее опасны

для окружающей среды. В данной ситуации под токсичностью скорее понимается содержание и комплексность смеси НК, чем концентрация индивидуального соединения. В отчете [27] приводятся возможные структуры НК, входящих в состав битуминозных песков и отходов при добыче нефти из песков.

Соединения с одним, двумя и тремя ароматическими кольцами, при длине боковой цепи $-(CH_2)_2$ и наличии одного метильного радикала были взяты нами для прогноза их БА расчетными методами, результаты которых приведены в табл. 5 и на рис. 4. В обучающей выборке НК отсутствуют.

Известно, что НК в высоких концентрациях могут поражать печень, вызывать депрессию нервной системы и затруднение дыхания, приводить при хроническом поступлении в организм к увеличению печени у различных гидробионтов [28, 29]; расчеты БА взятых нами НК подтвердили вероятность проявления данных эффектов.

Отметим, что вероятность проявления некоторых видов активности остается практически неизменной, несмотря на заметное изменение структуры. Пока нельзя сказать, является ли такая независимость реальным фактом или особенностью расчета.

Таблица 5

Результаты расчета БА некоторых нафтеновых кислот, которые могут присутствовать в отработанных промышленных водах при добыче нефти из битуминозных песков Канады (при $P_a > 0,5$)

Виды расчетной токсичности и вероятность их проявления (P_a)		
Отсутствует при $P_a > 0,5$	0,502 Тератоген	Отсутствует при $P_a > 0,5$
Отсутствует при $P_a > 0,5$	0,546 Токсичность (общая)	Отсутствует при $P_a > 0,5$
0,628 Нейротоксичность	0,679 Нейротоксичность	0,653 Нейротоксичность
0,618 Депрессия	0,670 Депрессия	0,561 Депрессия
0,587 Нефротоксичность	0,585 Нефротоксичность	0,625 Нефротоксичность
0,590 Гепатотоксичность	0,643 Гепатотоксичность	0,520 Гепатотоксичность
0,556 Вещество вызывает судороги	Отсутствует при $P_a > 0,5$	Отсутствует при $P_a > 0,5$
0,750 Вещество вызывает рвоту	Отсутствует при $P_a > 0,5$	0,723 Вещество вызывает рвоту
0,821 Повышение температуры тела	0,736 Повышение температуры тела	0,634 Повышение температуры тела

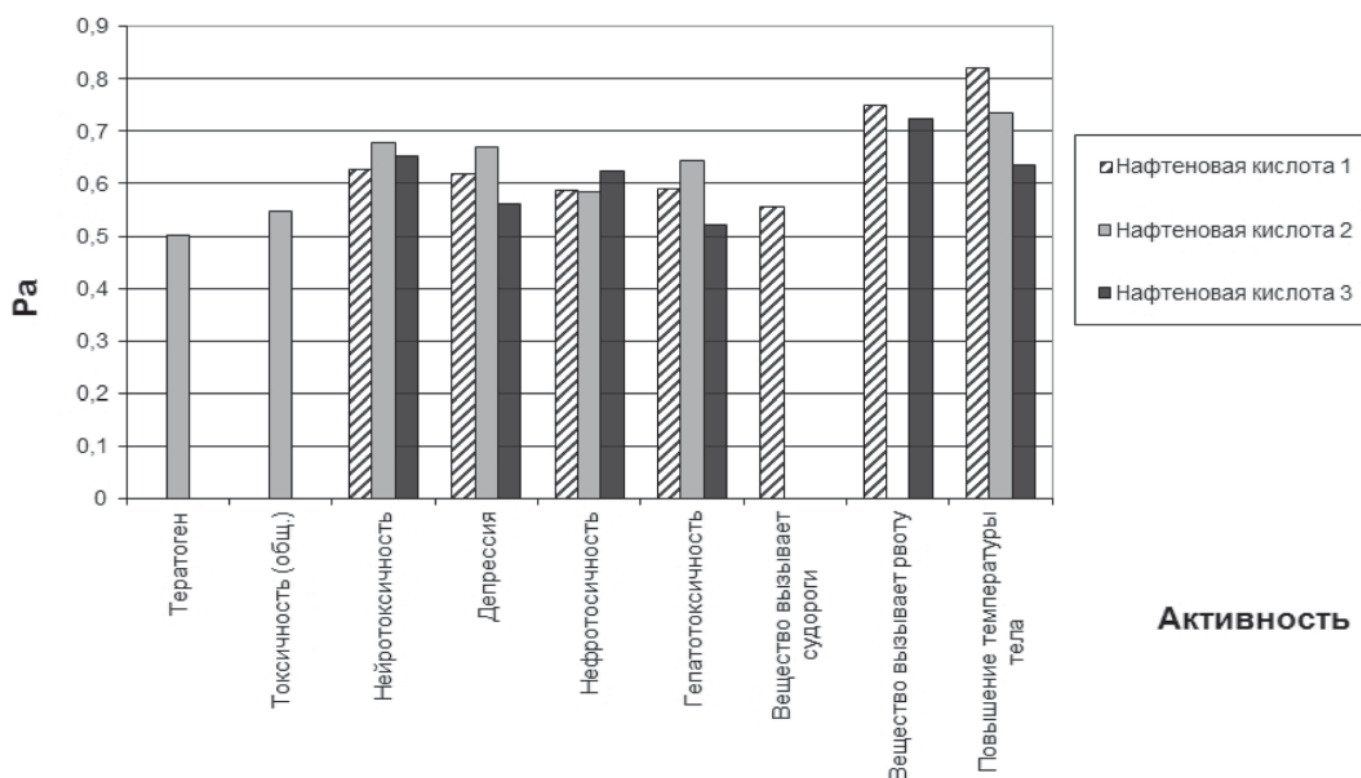


Рис. 4. Изменение БА в ряду различных нафтеновых кислот (см. табл. 5.)

Заключение

Использование информационных технологий, представленных в этой работе (поиск информации о веществе в электронных базах данных, методы оценки БА типа «структура-активность»), позволяет оценить БА индивидуальных углеводородов нефти, а также их вторичных продуктов, которые образуются под действием физико-химических или метаболических факторов. В некоторых случаях в информационных базах, которые собраны в системе, могут быть обнаружены сведения о ПДК или дозах, которые не предоставляет расчет по типу «структура-активность», но информация о присутствии веществ с выявленными видами токсичности (например, мутагенной, канцерогенной и т.д.) позволяет более корректно управлять экологическими рисками в процессе смягчения последствий аварийных разливов нефти, а также качественно предсказать возможные проявления этих последствий. Токсикологическая паспортизация нефти (детальный перечень нефтегенных УВ, входящих в определенный тип нефти) и соответствующий расчет БА этих УВ может быть полезен при составлении плана профилактических мер по отношению к возможному разливу нефти. Наряду с определением содержания в анализируемом типе нефти металлов и радионуклидов такой «паспорт» нефти позволит в ряде случаев принять априорные меры по снижению вредных последствий. Расчетный метод определения БА (токсичности) индивидуальных нефтегенных УВ, составляющих сырую нефть, продукты ее переработки, а также веществ, возникающих в результате трансформации УВ нефти в окружающей среде, наряду с другими подходами к оценке токсичности представляется

важным аспектом технологии, направленной на минимизацию экологических рисков при разливах нефти и нефтепродуктов, который практически не имеет альтернатив в связи с тем, что расчет ПДК для всех УВ нефти практически невозможен.

В принципе, расчетные методы позволяют также получить величины доз, обеспечивающих определенный уровень биологической безопасности вещества [30, 31]. Проблемой остается оценка интегрального экологического риска от определенной совокупности нефтегенных УВ, составляющих загрязнение от разлива в определенной зоне водного объекта, а также названного риска при учете вклада присутствующих в нефти металлов и других химических элементов, а также радионуклидов.

Авторы благодарят заведующего лабораторией Института биомедицинской химии им. В.Н. Ореховича РАН докт. биол. наук, проф. В.В. Поройкова и ведущего научного сотрудника этой лаборатории, канд. физ.-мат. наук Д.А. Филимонова за консультивное содействие в работе по программе PASS и полезные замечания, младшего научного сотрудника Института водных проблем РАН М.А. Чиганову за помощь в проведении расчетов.

Литература

1. Рябов В.Д. Химия нефти и газа. М.: ИД «Форум». 2009. 335 с.
2. Баренбойм Г.М. Устойчивое развитие: вода и нефть / Г.М. Баренбойм, Е.В. Веницианов, В.И. Данилов-Данильян // Вода: химия и экология. 2009. № 6. С. 2-8.
3. Блоков И.П. Краткий обзор о порывах нефтепроводов и объемах разливов нефти



- в России. Обзор Greenpeace. 2011. С. 1-2. Электронный ресурс: http://www.greenpeace.org/russia/Global/russia/report/Arctic-oil/Oil_spills.pdf
4. Рябов В.Д. Некоторые аспекты химической трансформации нефти в воде / В.Д. Рябов, Г.Н. Горгадзе, В.Н. Кошелев, Г.М. Баренбойм // Наука и технология углеводородов. 2000. № 4. С. 44-50.
 5. Баренбойм Г.М. Опыт ликвидации аварийных разливов нефти в Усинском районе Республики Коми / Г.М. Баренбойм, Г.Н. Ерцев, А.И. Таскаев и др. Сыктывкар: ГУП «Комимелиоводхозпроект». 2000. 182 с.
 6. Agency for Toxic Substances and Disease Registry (ATSDR). Toxicological Profile for Total Petroleum Hydrocarbons (TPH). Prepared by Research Triangle Institute for the U.S. Department of Health and Human Services Public Health Service Atlanta. GA. 1999. 315 p. Электронный ресурс: <http://www.atsdr.cdc.gov/ToxProfiles/tp123.pdf>
 7. Bell L. The Heavy Oil Power Deal. A Dark Cloud over East Timor's Bright Future. National Toxics Network. Australia. 2009. 17 p. Электронный ресурс: <http://www.laohamutuk.org/Oil/Power/NTNHeavyOilMar09.pdf>
 8. Филимонов Д.А. Прогноз спектра биологической активности органических соединений / Д.А. Филимонов, В.В. Поройков // Российский химический журнал. 2006. Т. 50, № 2. С. 66-75.
 9. Chemoinformatic Approaches to Virtual Screening. RCS Publishing. 2008. 335 p.
 10. Handbooks of Cheminformatics: From Data to Knowledge in 4 Volumes, Wiley –VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim. 2003. 1930 p.
 11. Todeschini R. Molecular Descriptors for Cheminformatics / Todeschini R., Consonni V. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim. 2009. V. 1-2. 1220 p.
 12. Баренбойм Г.М. Лекарственное загрязнение поверхностных и сточных вод / Г.М. Баренбойм, М.А. Чиганова // Вода: химия и экология. 2012. № 10. С. 40-46.
 13. Данилов-Данильян В.И. Новые методы оценки биологической активности ксенобиотиков в водных объектах / В.И. Данилов-Данильян, С.В. Храменков, В.В. Поройков, М.А. Чиганова, М.Н. Козлов, Д.А. Филимонов, Г.М. Баренбойм //: Материалы конф. «Методы анализа и контроля качества воды», Москва, 06.06.2012. М.: Науч. совет РАН по аналитической химии, Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН. 2012. С. 5
 14. Barenboim G. Water Monitoring: Estimation of Biological Hazard of Organic Xenobiotics (methodological aspects) / Barenboim G., Chiganova M., Poroikov V. // Water: Chemistry and Ecology. 2012. № 1. P. 3-12 (electronic version).
 15. Barenboim G. New Methods for Assessing of Ecological Risk of Individual Hydrocarbons in Emergency Oil Spills (in connection with the problem of environmental risk management) / Barenboim G., Saweka A., Chiganova M. // International Workshop Environmental Forensics. Tbilisi, Georgia. 2011. P. 157-163.
 16. International Programme on Chemical Safety (IPCS). "Environmental Health Criteria 122 n-Hexane". World Health Organization. Geneva. 1991. 29 p. Электронный ресурс: <http://www.inchem.org/documents/ehc/ehc/ehc122.htm>
 17. Agency for Toxic Substances and Disease Registry (ATSDR). Toxicological Profile for n-Hexane. Prepared by Research Triangle Institute for the U.S. Department of Health and Human Services Public Health Service. Atlanta. GA. 1999. 269 p. Электронный ресурс: <http://www.atsdr.cdc.gov/toxprofiles/tp113.pdf>
 18. Material safety data sheet (MSDS) for n-hexane. Sigma Aldrich. 2005. 7p. Электронный ресурс: <http://www.lookchem.com/msds/2009-6/Hexane.pdf>
 19. Office of Research and Standards. Massachusetts Department of Environmental Protection. Interim Final Petroleum Report: Development of Health-based Alternative to the Total Petroleum Hydrocarbon (TPH) Parameter. MADEP. Boston. 1994. 131 p. Электронный ресурс: <http://www.mass.gov/dep/cleanup/laws/alttph.pdf>
 20. Agency for Toxic Substances and Disease Registry (ATSDR). Toxicological Profile for Benzene. Prepared by Research Triangle Institute for the U.S. Department of Health and Human Services Public Health Service. Atlanta. GA. 2007. 265 p. Электронный ресурс: <http://www.atsdr.cdc.gov/ToxProfiles/tp3.pdf>
 21. U.S. Food and Drug Administration. Hydroquinone. Supporting Information for Toxicological Evaluation by the National Toxicology Program. Department of Health and Human Services. 2009. 13 p. Электронный ресурс: http://ntp.niehs.nih.gov/NTP/Noms/Support_Docs/Hydroquinone_may2009.pdf
 22. Баренбойм Г.М. Углеводороды нефти: индивидуальная токсичность / Г.М. Баренбойм, А.Ю. Савека, М.А. Чиганова // Методы оценки соответствия. 2011. № 8. С. 33-39.
 23. Barenboim G. New Methodological Aspects of Assessment of Biological Hazard of Oil Spill / Barenboim G., Saveka A. // 35th AMOP Technical Seminar on Environmental Contamination and Response. Vancouver. Canada. June 5-7. 2012. (представлена данному семинару)

24. Bennett B. Identification and Characterization of Reaction Proxies for Monitoring the Progress of Thermal Processing of Heavy Oils and Tar Sands / Bennett B., Larter S., Carbognani L., Pereira-Almao P. // *Energy & Fuels*. 2008. V.22. №1 . P. 440-448.
25. International Boreal Conservation Campaign (IBCC). Canada's Tar Sands: America's №1 Source of Oil Has Dangerous Global Consequences. Supporting Fact Sheet. 2008. 6 p. Электронный ресурс: <http://www.calproject.org/factsheet-ibcc-tarsands.pdf>
26. Timoney K. A Study of Water and Sediment Quality as Related to Public Health Issues, Fort Chipewyan, Alberta. Sherwood Park. Alberta. Canada. 2007. 82 p. Электронный ресурс: http://www.tothetarsands.ca/wp-content/uploads/2007/11/fc_final_report1-1.pdf
27. Holowenko F. Characterization of Naphthenic Acids in Oil Sands Wastewaters by Gas Chromatography-Mass Spectrometry / Holowenko F., MacKinnon M.D., Fedorak P.M. // *Water Research*. 2002. V. 36. № 11. P. 2843–2855. Электронный ресурс: http://144.206.159.178/ft/1092/63908/108_8014.pdf
28. Токсикология и гигиена продуктов нефтехимии и нефтехимических производств. М-во здравоохранения РСФСР, Ярослав. мед. ин-т, М-во нефтеперераб. и нефтехим. пром-ти СССР. 1972. С. 217-220.
29. Официальный сайт Агентства по защите окружающей среды Канады (Environment Canada) Электронный ресурс: <http://www.ec.gc.ca/inrp-npri/default.asp?lang=en&n=AC708134-1>
30. Lagunin A.A. QSAR Modelling of Rat Acute Toxicity on the Basis of PASS / Lagunin A.A., Zakharov A.V., Filimonov D.A., Poroikov V.V. // *Molecular Informatics*. 2011. V. 30. № 2-3. P. 241–250. Электронный ресурс: <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/minf.201000151/pdf>
31. Filimonov D.A. QNA based 'Star Track' QSAR approach / Filimonov D.A., Zakharov A.V., Lagunin A.A., Poroikov V.V. // *SAR and QSAR in Environmental Research*. 2009. V. 20. № 7-8. P. 679-709.



G. M. Barenboim, A.Yu. Saveka, V.D. Ryabov

NEW ASPECTS OF METHODOLOGY FOR ESTIMATION OF BIOLOGICAL ACTIVITY OF OIL SPILLS

Oil spills cause it gradual dispersion on various groups of individual hydrocarbons (HC) that divide in complicated fashion under environmental conditions. This research proves necessity of toxicity estimation of individual HC. Using information technology including biological activity calculations based on chemical structure of substances is proposed and their application for some real-world examples is estimated.

Key words: Oil spills, oil hydrocarbons, biological activity, protection of water, pollution of sediments, individual toxicity of hydrocarbons, calculations "structure-activity"

