

Несмотря на большой объём проведённых исследований, многое ещё остаётся неясным. Очевидно, что функций вида $P=f(ТИ)$, (методом проб и ошибок) можно подобрать достаточно много. Выбор индексов часто носит случайный характер, а корреляционные зависимости между ТИ и свойствами не имеют под собой прочного теоретического фундамента и плохо поддаются четкой физико-химической интерпретации.

При использовании того или иного топологического индекса важно знать: представляет ли исследуемый ТИ интерес для корреляций "структура-свойство" или не имеет ценности (не способен отражать важные структурные особенности молекул или дублирует информацию, получаемую с помощью других индексов). В связи с этим остаётся открытым вопрос о расширении возможностей ТИ для достаточно полного отражения пространственной структуры молекул.

Другой путь – использование ТИ в построении аддитивных схем расчёта и прогнозирования

Следует, однако, помнить, что выбор ТИ нередко носит случайный характер; они могут не отражать важные структурные особенности молекул или дублировать информацию, а расчетные схемы не имеют прочного теоретического фундамента и плохо поддаются физико-химической интерпретации.

При изучении корреляций структура – свойство можно использовать графические зависимости вида «Свойство – ТИ», «Свойство – номер изомера» и «ТИ – номер изомера», показывающих характер изменения свойства и топологических индексов алканов при переходе от одного изомера к другому.

Анализ диаграмм нужно принимать во внимание при аналитическом представлении зависимостей "Свойство вещества P - ТИ графа молекулы" и для адекватного описания каждого свойства лучше всего подбирать свой индекс.

Топологические индексы могут также применяться при разработке новых лекарственных средств, прогнозировании степени распространения и потенциальной опасности различных загрязнителей в окружающей среде, при оценке канцерогенной активности некоторых химических веществ и даже для регулирования вкусовых качеств многих пищевых продуктов (в частности, пива).

Например, индексы Винера могут быть использованы для предсказания относительной устойчивости новых (ещё не синтезированных) соединений, моделирования различных процессов в кристаллах.

Индексы молекулярной связности хорошо коррелируют с разнообразными проявлениями биологической активности соединений, со способностью некоторых из них подавлять рост бактерий возбудителей тифа и туберкулёза и могут служить в качестве эффективного критерия мутагенной активности нитрозаминов. Предпринимаются также попытки найти корреляцию ТИ со способностью некоторых молекул вызывать образование злокачественных опухолей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Папулов Ю.Г., Левин В.П., Виноградова М.Г. Строение вещества в естественнонаучной картине

мира: Молекулярные аспекты. Учебное пособие, 2-ое издание. Тверь: ТвГУ, 2005. 208 с.

2. Виноградова М.Г., Папулов Ю.Г., Смоляков В.М. Количественные корреляции «структура свойство» алканов. Аддитивные схемы расчета. Тверь, 1999. 96 с.

3. Химические приложения топологии и теории графов/Под ред. Р.Кинга. М.: Мир, 1987. 560 с.

4. Применение теории графов в химии/Под ред. Н.С. Зефирова и С.И. Кучанова. Новосибирск: Наука, 1988. 306 с.

5. Станкевич М.И., Станкевич И.В., Зефиров Н.С. Топологические индексы в органической химии//Успехи химии. 1988. Т.57, №3, С.337-366.

ХИМИКО-ЭКОЛОГИЧЕСКИЙ МОНИТОРИНГ СНЕГОВОГО ПОКРОВА ГОРОДА ТЮМЕНИ

Ларина Н.С., Куранова М.Н., Палецких Н.С.

Тюменский государственный университет,
Тюмень

Состояние окружающей среды крупных городов обычно оценивается по состоянию отдельных ее составляющих: атмосферного воздуха, поверхностных и подземных вод, почв и растительного покрова, здоровья горожан. Наиболее динамичной и поэтому наиболее сложной для анализа является атмосфера, которая оказывает существенное влияние на состояние всех компонентов экосистемы. Для мониторинга атмосферы можно использовать различные объекты и методы анализа, каждый из которых имеет свои ограничения и достоинства. Наиболее активно используемый метод контроля официальными органами – непосредственный анализ воздуха приземной атмосферы, который проводится либо на стационарных станциях контроля (обычно автоматический контроль), либо с использованием разового или периодического отбора проб воздуха в наиболее подверженных загрязнению районах города. Данный метод, особенно в автоматическом режиме, при достаточно большом количестве станций имеет несомненные преимущества. К наиболее важным из которых можно отнести оперативность оценки состояния атмосферы и, соответственно, возможность быстрого реагирования при аварийных ситуациях, а также возможность автоматической компьютерной обработки и обобщения получаемой информации. Однако, это дорогостоящий метод мониторинга, т.к. требует полного охвата исследуемой территории такими станциями. Кроме того, затруднено получение интегральных показателей загрязненности, которые позволили бы говорить об экологическом состоянии того или иного микрорайона города и суммарном воздействии загрязняющих показателей на состояние окружающей среды, в том числе и человека. В этом случае рациональнее использовать другие объекты анализа, которые позволяют проводить сезонный (снег, листья, лишайники), многогодовой (по кольцам деревьев) и многовековой мониторинг (по верховым торфяникам, донным отложениям). Такое разнообразие объектов анализа позволяет решать различные задачи мониторинга с разной степенью инте-

грации результатов, их относительной независимостью.

Целью нашей работы являлась разработка комплексного подхода к мониторингу атмосферного воздуха с использованием различных объектов анализа и извлечением разного рода информации о состоянии атмосферы и загрязняющих ее компонентов, источников их поступления и области распространения.

Объективным показателем качества атмосферного воздуха в городе в зимний период времени является содержание различных загрязнителей в снежном покрове. Концентрация загрязняющих веществ в снеге на 2 – 3 порядка выше, чем в атмосферном воздухе,

измерения содержания веществ могут производиться достаточно простыми методами анализа, а легкий отбор проб, не требующий специального сложного оборудования, делает метод снегосъемки еще более универсальным.

Пробы снега в различных районах города, а также фоновая точка были отобраны в 2004-2006 годах согласно руководству по контролю загрязнения атмосферы. Все пробы снега анализировались на содержание тяжелых металлов, железа, сульфатов и нитратов по стандартным методикам. В таблице 1 приведены средние значения и интервалы колебаний общих показателей в снеге за 2004-2006 гг.

Таблица 1. Средние значения и интервалы общих показателей в пробах снега

Показатель	2004 год (n=16)	2005 год (n=24)	2006 год (n=33)
pH	$5,52 \pm 0,31$ 5,09 – 6,45	$6,52 \pm 0,37$ 5,17 – 7,30	$7,61 \pm 0,43$ 7,09 – 8,15
HCO_3^- , мг/дм ³	$22,88 \pm 3,21$ 9,80 – 46,40	$26,26 \pm 3,68$ 6,50 – 105,10	$55,93 \pm 7,83$ 26,45 – 100,52
NO_3^- , мг/дм ³	$2,92 \pm 0,53$ 0,78 – 4,84	$2,57 \pm 0,46$ 0,38 – 10,87	$2,94 \pm 0,53$ 1,00 – 22,03
SO_4^{2-} , мг/дм ³	$9,91 \pm 1,98$ 3,80 – 20,30	$12,64 \pm 2,53$ 4,70 – 33,00	$13,39 \pm 2,68$ 6,15 – 41,01
ПО, мг О/дм ³	$12,6 \pm 1,3$ 3,0 – 17,0	$8,34 \pm 0,83$ 0,40 – 49,00	$4,36 \pm 0,44$ 3,41 – 6,70
Э/провод, мкСм/см	$74,1 \pm 1,5$ 21,8 – 183,5	$81,9 \pm 1,6$ 25,0 – 233,2	$205,2 \pm 4,1$ 83,0 – 640,0

Надежным индикатором влияния хозяйственной деятельности является величина показателя относительной кислотности (pH/pNH₄) [1]. В центральных районах города величина показателя относительной кислотности составляет от 2,0 до 4,5, что свидетельствует о высоком уровне загрязнения атмосферы. В удаленных от центра районах, неподверженных или слабо подверженных воздействию промышленных

газопылевых выбросов, величина pH/pNH₄ составляет 1,0 – 1,81.

Для интегральной оценки загрязнения атмосферы часто используют *суммарную плотность загрязнения воздуха* [2], которая показывает суммарное количество загрязняющих веществ в снежном покрове. Однако рассчитать эту величину можно с использованием как абсолютных, так и относительных концентраций (табл. 2).

Таблица 2. Суммарная плотность загрязнения воздуха

Год	Q, моль/дм ³ *10 ⁻³	Q, мг/дм ³	Zc*
2004	0,52	26,49	45,15
2005	0,51	25,64	43,25
2006	0,58	27,97	47,74

Zc* – суммарная плотность загрязнения, которая равна сумме коэффициентов концентраций химических элементов-загрязнителей и выражается формулой: $Zc = \sum (K_{ci} + \dots + K_{cn}) - (n - 1)$, где n – число определяемых суммируемых вещества; K_{ci} – коэффициент концентрации i-го компонента загрязнения.

Сравнивая полученные данные можно отметить, что характер изменения этих величин аналогичен, но наиболее достоверными являются относительные величины, т.к. они отнесены к фоновым содержаниям, полученным в каждом году, с учетом количества выпавших осадков и времени снегонакопления, которые от года к году могут меняться значительно.

Для анализа уровня загрязнения отдельных районов города рассчитывают *относительную плотность загрязнения воздуха (I)*, которая рассчитывается

как отношение суммарной плотности загрязнения в исследуемом районе к суммарной плотности загрязнения в городе или по отношению к фоновому содержанию. По данному показателю все точки отбора проб снега можно разделить на три группы: с высокой (более 1), средней (0,5 – 1) и низкой (0 – 0,5) степенью загрязнения. К районам с высокой степенью загрязнения относятся территории возле автострад, стоянок грузового и легкового транспорта. К районам со средней степенью загрязнения относятся практически все центральные районы города, а к районам с низкой степенью загрязнения воздуха относятся жилые районы, защищенные от автодорог высокими домами. Таким образом, практически все исследованные нами районы относятся к районам с высокой степенью загрязнения, и лишь район Земельного комитета, кото-

рый значительно удален от дорог, относится к средней степени загрязнения.

Также характеристикой загрязнения снега может служить коэффициент превышения ПДК тяжелых металлов, которые при снеготаянии могут попасть в

другие природные среды. Данный коэффициент рассчитывается как отношение суммы концентраций металла в водной и твердой фазах снега в мкг/дм³ к его ПДК в поверхностных водах. Мониторинг по данному параметру представлен в таблице 3.

Таблица 3. Коэффициент превышения ПДК металлов в снеге 2006 г.

№ п/п	Район	Fe	Pb	Cu	Zn
1.	Земельный комитет	1,33	0,18	0,09	-
2.	Станкостроит. завод	4,33	0,36	0,15	0,04
3.	Центральная площадь	3,73	0,65	0,20	0,13
4.	Московский тракт	5,2	0,31	0,61	0,17
5.	Аккумуляторный завод	1,3	1,80	0,39	0,14
6.	К/р Современник	0,86	0,35	0,16	0,17
7.	ТГМА	0,93	0,44	0,19	0,19
8.	Сквер ЭГФ	12,6	0,48	0,41	0,39
9.	Тобольский тракт	1,6	0,46	0,81	0,43
10.	Гилевская роща	0,73	0,93	0,96	0,27
11.	Червишевский тракт	1,63	0,48	0,02	0,17
12.	Роща Оловянного	1,03	0,98	-	0,41
13.	Среднее значение	2,94	0,62	0,33	0,29

Металлы в основном сосредоточены в минеральной компоненте снега (пыль), причем их концентрации в несколько раз превышают ПДК для поверхностных вод. Максимальные значения данного показателя для цинка, меди и свинца отмечены для проб отобранных в районах Аккумуляторного завода, Гилевской рощи, роща Оловянного, Центральной площади и сквера ЭГФ. В 2006 году в снеге содержа-

ние свинца значительно ниже, чем его содержание в 1998, 2004 и 2005 года. Цинк обнаружен лишь в пылевой компоненте снега 2006 года и в 2 – 3 раза больше, чем в другие годы. Концентрация меди в снежном покрове 2006 года превышает значение прошлых лет в несколько раз и большая ее часть находится в пылевой компоненте.

Таблица 4. Коэффициент превышения ПДК металлов по городу

ТМ	1998 год [3]		2004 год		2005 год		2006 год	
	город	фон	город	фон	город	фон	город	фон
Pb	2,90	0,28	2,98	0,16	2,87	0,24	0,62	0,25
Zn	0,12	0,06	0,08	0,02	0,10	0,01	0,27	-
Cu	0,02	0,007	0,04	0,02	0,04	0,03	0,33	0,04

В целом снежный покров городской среды 2006 года можно описать общими формулами:

- $12,9 \text{ Cl}_{35}\text{HCO}_3 \text{ }_{13}\text{SO}_4 \text{ }_2 / \text{Na} + \text{K}_{41}\text{Ca}_7\text{Mg}_2$ - ионный состав снега;

- $21,6 \text{ Pb}_{11,26}\text{Cu}_{7,95}\text{Fe}_{4,35}\text{Cd}_{1,06}$ – водная фаза снега;

- $13,25\text{Pb}_{5,76}\text{Zn}_{5,58}\text{Cu}_{2,32}\text{Cd}_{1,07}$ – твердая фаза снега.

В формуле ионного состава снега перед дробью указан суммарный показатель загрязнения, в числителе анионы, в знаменателе катионы. Цифровой символ указывает процентный состав анионов и катионов. В формулах, описывающих фазы снега, перед дробью указан суммарный показатель загрязнения, а цифровой символ указывает коэффициент концентрации (превышение над фоновым значением).

Использование химического анализа снежного покрова позволяет не только оценить суммарную и относительную загрязненность воздуха в городе, но и оценить наличие источников загрязнения и область их влияния. Все источники загрязнения можно разделить на стационарные (предприятия) и мобильные (автомобильные и железнодорожные магистрали). Так, находящийся на территории города аккумуляторный завод, большая часть производственных мощностей

которого несколько лет назад была вынесена за территорию города, по-прежнему существенно загрязняет атмосферу города свинцом. На расстоянии 1 км от источника загрязнения наблюдается двукратное превышение содержания свинца в снежном покрове и только на расстоянии 2 км наблюдается его снижение до среднего по городу. При этом область двукратного загрязнения захватывает часть жилого микрорайона, примыкающего к территории завода. Влияние автомобильного транспорта на загрязнение прилегающих территорий было изучено в нескольких районах города. С этой целью пробы снега отбирались на расстоянии 5, 10 и 15 м от проезжей части, а также на останках. Наибольшее содержание меди, свинца и цинка отмечается в районе Гилевской рощи и Тобольского тракта. В некоторых районах города концентрация меди на расстоянии 10 м от дорог снижается почти в 2 раза. Свинец был обнаружен как в водной фазе снега, так и в пылевой компоненте. С удалением от дороги (10 и 15м) наблюдается снижение концентрации свинца в 2 – 4 раза в обеих фазах. Это позволяет предположить, что существенный вклад в загрязнение атмосферы этими металлами вносит грузовой транс-

порт, передвижение которого в городе ограничено. Цинк был обнаружен лишь в минеральной части снега.

*Работа выполнена при поддержке грантов РГНФ №04-06-00387 и РФФИ № 04-05-65200, гранта Губернатора Тюменской области.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Новороцкая А.Г. Химический состав снежного покрова как индикатор экологического состояния Нижнего Приамурья //Автореферат диссертации на соискание ученой степени географических наук. Науч. рук. Иванов А.В. – Хабаровск. - 2002. – 24с.

2. Королева Г.П., Верхозина А.В., Гапон А.Е. Геохимический мониторинг загрязнения снегового покрова металлами – этоксикантами (Южное Прибайкалье) //Инженерная экология. – 2005. - № 3. – С. 22-34.

3. Геоэкологические проблемы Тюменского региона: Сборник, выпуск 1. Тюмень: изд-во «Вектор», 2004. – 168с.

ИНФОРМАЦИОННАЯ КУРОРТОЛОГИЯ

Петров И.М., Петров М.Н.
*Красноярский государственный
технический университет,
Красноярск*

В последнее время в России и за рубежом большое внимание уделяется исследованиям свойств воды с точки зрения возможности накопления и переноса информации. При этом доказано, что вода «помнит», вода помнить свойства, вещества которые в ней когда-то растворяли; что вода поддается магнитной обработке; вода меняет свои физические свойства в зависимости от цвета скатерти, на которой стоит стакан. Эффект памяти воды давно уже вошел в медицинскую практику: гомеопатия ныне — официально признана, как метод лечения. Гомеопаты растворяют лекарство в таких ничтожных концентрациях, что на ведро воды остаётся несколько молекул лекарства и этого достаточно для лечения. Эффект омагничивания воды также давно используется на практике теплотехниками. В России защищена первая докторская диссертация о памяти воды. Это событие мало кому известно. Диссертация защищена в институте медико-биологических проблем РАН. Автор диссертации руководитель Проблемной лаборатории научного обоснования традиционных методов диагностики и лечения Федерального научного клинико - экспериментального центра Минздрава РФ Станислав Зенин.

H₂O - два атома водорода, один атом кислорода. Молекула воды в целом электронейтральна, это диполь. С одного края у неё преобладает отрицательный заряд, а с другой — положительный. Между собой диполи могут образовывать соединения — молекула воды отрицательным краем может притянуть к себе другую молекулу за её положительный край. Диполь многомерен и, следовательно, возможно присоединение нескольких молекул. Образуется водородная связь. Зенин показал, что короткоживущий ассоциант из пяти молекул воды при соединении с другим таким

же короткоживущим ассоциантом из пяти молекул воды может образовать структуру.

Расчёты показали, что может существовать такой кристалл в обычной жидкости воды, состоящий из 912 молекул, время жизни, которого - минуты и даже часы.

Это образование назвали «основным структурным элементом воды». Он похож на маленький кристаллик льда из шести ромбических граней. В воде миллиарды таких кристалликов. Их существование уже доказано и подтверждено разными физико-химическими методами.

На поверхности каждой грани каждого кристаллика может быть выложен свой случайный рисунок электрических «плюсов» и «минусов». Это дипольные молекулы воды, составляющие грань кристаллика, торчат из нее наружу то плюсом, то минусом. Получается многомерный двоичный код, как в ЭВМ. Вода может накапливать и передавать информацию. Информационно-фазовое состояние воды позволяет ей выступать в виде базы данных глобального размера с множественным доступом к базе для снятия и записи данных. Японские учёные установили, что вода запоминает информацию с листа бумаги, если на нём написать информацию, возможно запоминания и со слов произнесённых человеком. Всё это говорит о том, что данный вопрос находится только в самом начале изучения и исследования.

В свете изложенного выше рассмотрим вопрос о посещении курортов и здравниц с точки зрения информационного очищения и информационного обмена человека.

Так как человек более чем на 80 % состоит из воды, то посещение здравниц необходимо рассмотреть не только с точки зрения получения традиционных услуг, но и с точки зрения изменения информативной структуры человека вследствие изменения структурной решётки воды, из которой состоит человек. Это происходит двумя путями:

1. Получение новой информационной структуры с водой непосредственно из водных источников (давно замечено, что вода помогает эффективней, когда её пьют из самого источника и не используют транспортировку и хранение). Этому теперь есть простое объяснение — в ходе транспортировки и хранения вода помимо химических свойств ещё и изменяет свою информационную структуру, получая отрицательную, как правило, информацию. После потребления воды из источников человек становился как бы одухотворенным, а это и есть получение объёма положительной, полезной информации вместе с водой. Вода, являясь информационной памятью, передаёт информацию воде находящейся в составе организма человека.

2. Получение положительной информации происходит и при принятии водных процедур в реках и морях. При купании в природных источниках можно получать положительную информацию, через принятие структурированной воды в организме человека под действием структуры воды морей и рек. При этом купание в искусственных водоёмах и бассейнах не гарантирует получение полезной информации, так как