личество, как правило, не представляет серьезной опасности для здоровья. Но следует иметь в виду, что при взаимодействии гексацианоферрата с некоторыми кислотами может выделяться значительное количество сильно токсичного газа – цианистого водорода (HCN):

$$K_4[Fe(CN)_6] + 4HCl = H_4[Fe(CN)_6] + 4KCl$$

$$3H_4[Fe(CN)_6] = Fe_3C + 5C + 3N_2 + 12HCN$$

Пока нет никаких данных о результатах биотестов о характере поведения пищевой добавки Е-536 при различных способах обработки вещества (жарка, варка и пр.). И хотя в пищевых продуктах гексацианоферрат калия обычно используется в малых дозах и лишь в смеси с поваренной солью, при нарушении технологии, превышении допустимой нормы в продукте, гексацианоферрат калия может представлять серьезную угрозу для здоровья человека.

Если прибавлять к пище ежедневно около 20 граммов соли, человек сьедает ее в среднем в год 7-8 килограммов. К семидесятому году это количество составит полтонны. Следует задуматься, какую соль использовать: то ли обычную каменную, то ли «Экстру», которая может отравлять организм цианистыми соединениями.

ВЛИЯНИЕ ИОНОВ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ НА МОЛЕКУЛЯРНУЮ СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА ФУНГИЦИДОВ

Орлин Н.А.

Владимирский государственный университет, Владимир, e-mail: ornik@mail.ru

Фунгициды – это химические препараты, предназначенные для защиты растений от различных болезней. Они по объему производства, потребления и ассортимента занимают третье место среди номенклатуры пестицидов.

В настоящее время к фунгицидам предъявляются высокие требования. Фунгициды должны быть эффективны при применении в низких концентрациях, обладать высокой избирательностью, иметь низкую токсичность для теплокровных животных и человека, должны быть безопасны окружающей среды. Вследствие этого актуальным становится мониторинг таких веществ и изучение процессов, которые происходят или могут происходить с ними в природных условиях, в том числе и их взаимодействие с ионами тяжелых металлов, находящихся в почве. Это позволит наиболее эффективно защищать растения грибковых заболеваний, не нанося при этом существенного вреда окружающей среде.

Данная работа посвящена изучению процессов взаимодействия фунгицидов ряда триазолов: дифеноконазола (препарат «Скор»), бромуконазола (препарат «Вектра») и пенконазола (препарат «Топаз») с ионами ряда тяжелых металлов.

Исследование фунгицидов в контакте с ионами Pb^{2+}, Fe^{2+}, Cu^{2+} показали, что молекулы фунгицидов способны вступать в процесс комплексообразования с соединениями, содержащими ионы металлов.

Исходя из теории образования комплексов ионы металлов Pb^{2+}, Fe^{2+}, Cu^{2+} имеют в своем электронном строении на внешнем квантовом уровне свободные d-орбитали и выступают акцепторами в процессе комплексообразования. Лиганды, молекулы или ионы, содержат в своей структуре участки, на которых сосредоточен отрицательный заряд, так называемый «неподеленной электронной парой», выступают донорами в процессе комплексообразования.

Молекулы фунгицидов имеют сложное строение, например, брутто формула дифеноконазола $C_{19}N_3O_3Cl_2H_{16}$ содержит 5 различных химических элементов. Чтобы определить, за счет каких атомов в молекуле дифеноконазола происходит образование донорно-акцепторной связи, были рассчитаны заряды на каждом атоме молекулы дифеноконазола. Для расчета использовали компьютерную программу Chem 3D Ultra 9.0 методом PM3. Расчеты показали, что в молекуле дифеноконазола в качестве доноров выступает атом азота в пятичленном кольце и атом кислорода в другом пятичленном кольце. Следовательно, молекулы дифеноконазола являются дидентантными лигандами. Состав комплекса с ионом свинца можно представить следующей формулой:

$$\{Pb(C_{19}N_3O_3Cl_2H_{16})_2\}^{2+}$$

Образование комплексов дифеноконазол–металл подтверждено изучением ИК спектров. Сравнивая инфракрасные спектры чистого дифеноконазола и его комплекса со свинцом, можно заметить ряд характерных отличий. На ИК спектрах комплексного соединения наблюдается значительное уширение некоторых пиков, падение их интенсивности вплоть до полного исчезновения по сравнению со спектрами чистого инсектицида. Это характерно для координационных соединений, образование которых приводит к изменению структуры лигандов. На

обоих спектрах присутствуют пики в области 1500 – 1600 см$^{-1}$ и 3100 см$^{-1}$, которые интерпретируются как полосы поглощения бензольных колец. Мало изменяются полосы 780 и 840 см$^{-1}$, которые относятся к заместителям в бензольном кольце фунгицида. Другие полосы претерпевают существенное изменение. Они либо сдвигаются, либо уменьшаются в интенсивности, либо совсем исчезают. В тоже время в спектрах комплексов появляются новые достаточно интенсивные полосы. Так в ИК спектре комплекса дифеноконазол – Pb появляется четкий пик при 573 см$^{-1}$, относящийся к колебаниям Me-N комплекса и пик при 620 см$^{-1}$, относящийся к колебаниям Me-O комплекса.

Детальное рассмотрение ИК спектров показывает, что молекулы фунгицида, попадая в поле комплексообразователя – иона металла, меняют свою пространственную геометрию, что свидетельствует об изменении полос поглощения, относящихся к колебаниям отдельных частей молекул. Только бензольные кольца , как наиболее устойчивые части молекулы, остаются неизменными.

В связи с образованием комплексов молекул фунгицидов с ионами металлов возникла необходимость в изучении фунгицидной эффективности закомплексованных препаратов и изменению их устойчивости в природной среде. Исследования проводились в течение 50 суток. Экспериментально установлено, что за этот период степень распада чистого дифеноконазола при значении pH = 6,5 составляет около 17%. Это значит, что дифеноконазол является препаратом продолжительного действия. С одной стороны, это способствует накоплению фунгицида в обьектах окружающей среды и продукции сельского хозяйства. Установлено, что при взаимодействии фунгицидов с ионами металлов, происходит образование прочных комплексов, что в свою очередь приводит к снижению скорости гидролиза фунгицидов. Так, дифеноконазол в комплексе со свинцом в течение 50 суток гидролизуется (т.е. распадается) всего на 8,9%. Это значит, что его устойчивость увеличивается почти в два раза. Легко сделать вывод, что комплексные прочнее чистых фунгицидов, они труднее распадаются и способны в значительной степени накапливаться в почве, неблагоприятно влиять на окружающую среду и продукцию земледелия.

Для изучения влияния тяжелых металлов на эффективность фунгицидных препаратов определялась их токсичность. В качестве обьектов исследования были использованы грибы Penicillium digitatum, которые вызывают заболевание цитрусовых плодов под названием «оливковая гниль». Результаты исследования следующие. Если принять токсичность чистого дифеноконазола за 100%, то токсичность комплекса дифеноконазол-Pb составляет всего 47%.

Общий вывод. Взаимодействие фунгицидов с ионами металлов приводит к резкому падению их токсичности, к замедлению распада в окружающей среде и к увеличению их степени накопления в почве с дальнейшим переходом в продукты земледелия.

КОЭФФИЦИЕНТ БИОЛОГИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ КАК ОДИН ИЗ КРИТЕРИЕВ НАКОПЛЕНИЯ ИОНОВ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ В РАЗЛИЧНЫХ ПОРОДАХ ДРЕВЕСНЫХ РАСТЕНИЙ

Шарифзянов Р.Б., Давыдова О.А., Климов Е.С.

Ульяновский государственный технический университет, Ульяновск, e-mail: RasimSB@mail.ru

Проведенные исследования по накоплению ионов тяжелых металлов в различных породах древесных растений г. Ульяновска привели к следующим результатам.

Для оценки эффективности поглощения микроэлементов, нами использован коэффициент биологического поглощения (КБП), представляющий собой частное от деления содержания микроэлемента в золе растительного материала на его содержание в корнеобитаемом слое почвы. В летний период у березы повислой и липы мелколистной установлено наибольшее значение КБП цинка. Максимальные значения КБП хрома в летний период отмечаются в листьях тополя черного. В осенний, зимний и весенний периоды – в ветвях березы повислой и липы мелколистной. Наибольшие значения КБП никеля установлены в пробах растительного материала березы повислой. Высокие значения КБП меди (КБП = 1-20) в районе развязки автодорог в Ленинском районе г. Ульяновска (перекресток улиц Робеспьера и К. Маркса) во всех исследуемых породах древесных растений за период исследований. Наибольшие значения КБП свинца установлены в пробах ветвей тополя черного. В его листьях определен высокий коэффициент биологического поглощения железа в летний период.