

**БИОЭКОЛОГИЧЕСКАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА
АКВАТОРИИ ТЕРСКО-КАСПИЙСКОГО
РЫБОХОЗЯЙСТВЕННОГО
РАЙОНА КАСПИЯ**

Османов М.М., Алигаджиев М.М., Амаева Ф.Ш.
*Прикаспийский институт
биологических ресурсов ДНЦ РАН,
Махачкала*

Придельтовая зона р. Терек является местом воспроизводства и нагула ценных полупроходных и гудовных рыб Каспия. В пределах влияния вод Терека находятся основные зоны промысла и воспроизводства, а также индустриального развития осетровых. Учитывая высокую значимость Терека для жизнедеятельности обширного региона и его влияние на экологическую среду дагестанского побережья Каспия, а также растущую интенсивность водопользования для нужд многих отраслей и в первую очередь в интересах сельского и рыбного хозяйства, возникает очевидная необходимость изучения состояния водных и биологических ресурсов бассейна Терека.

Наши исследования, проведенные за последние десять лет, показывают, что с 1995 года в этом районе Каспия за счет интенсивного загрязнения нефтепродуктами ухудшаются экологические условия. Это приводит к глубоким изменениям исторически сложившегося биологического равновесия и пагубно влияет на биологическую продуктивность региона.

Содержание нефтепродуктов в придельтовой зоне в 1995 - 2000 годах увеличилось почти в 5 раз, составляя 120 - 650 ПДК соответственно. Залповые выбросы нефтепродуктов в реку создают опасную ситуацию накопления их в донных отложениях вплоть

до 10 метровых глубин, превращая их в постоянный источник загрязнения.

Неблагоприятная экологическая обстановка р. Терек отражается и на биологической продуктивности устьевой зоны моря. Так, количественные показатели гидробионтов с апреля по июнь в период массового их развития по фито ($0,3 \text{ мг/м}^3$) и зоопланктону ($20\text{-}50 \text{ мг/м}^3$) почти на порядок ниже средних значений 80-х годов прошлого века. С начала июля на качественный и количественный состав гидробионтов, как и по всему побережью, влияет также хищнический пресс недавнего вселенца гребневика *Mnemiopsis leidyi*. Средняя биомасса зоопланктона в этот период составляет всего $10\text{-}15 \text{ мг/м}^3$ в основном за счет веслоногого рачка акарция.

По сравнению с 1980 годом численность и биомасса кормовых бентосных организмов в дагестанском прибрежном районе Каспия снизились более чем 5-6 раз, при этом в устьевой зоне р. Терек эти показатели снизились более чем на порядок.

По данным КаспНИРХ у пойманной в приустьевом пространстве рыбы (сазан, толстолобик) при концентрации в воде нефтепродуктов $0,65 \text{ мг/л}^3$ (13 ПДК) отмечены отсутствие слизи на жаберных тычинках и деформация желудочно-кишечного тракта. При этом содержание нефтепродуктов в органах и тканях составили: жабры – $2,2\text{-}6,4 \text{ мг/г}$; мышечная ткань – $0,5\text{-}0,7 \text{ мг/г}$ и печень – $0,8\text{-}1,2 \text{ мг/г}$.

Таким образом, неустойчивость и динамичность природных и антропогенных процессов протекающих в регионе, выдвигает задачу проведения долгосрочного мониторинга с целью анализа и прогнозирования изменений в соответствии с существующими и наиболее вероятными тенденциями развития биоэкологической ситуации.

Компьютерное моделирование в науке и технике

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
СПЕКТРАЛЬНЫХ СЕРИЙ ИОНОВ
ХЛОРООРГАНИЧЕСКИХ ПЕСТИЦИДОВ**

Абрамов Е.И., Богатов Н.М.,
Буков Н.Н., Панюшкин В.Т.
*Кубанский государственный университет,
Краснодар*

Идентификация органических соединений необходима для решения задач экологии, фармакологии и медицины, химии, пищевой технологии и др. Особенно актуальна эта проблема при анализе суперэкоотоксикантов, получивших свое название за способность разрушительно влиять на организм человека даже в микроскопических дозах [1]. В выбросах промышленных предприятий суперэкоотоксиканты перемешаны в различных сочетаниях, и зачастую в малых концентрациях. Поэтому проблема их распознавания достаточно сложна. Для обнаружения и идентификации суперэкоотоксикантов используются методы масс-спектрометрии как достаточно чувствительные и информативные. Эти исследования стоят дорого, так как используется современная сложная эксперименталь-

ная техника, а анализ выполняют квалифицированные эксперты.

С целью повышения эффективности и достоверности анализа создана компьютерная экспертная система извлечения и структурирования знаний при анализе масс-спектров хлорорганических пестицидов (ХОП). Составной частью этой системы является программный модуль моделирования спектральных серий хлорсодержащих ионов.

При моделировании спектральных серий используется структурная зависимость интенсивностей сигналов мультиплета молекулярного иона (M^+) от количества входящих в состав молекулы ХОП атомов хлора [2], позволяющая определять брутто-формулы химических соединений. Эта возможность основана на том, что интенсивности изотопных пиков мультиплета M^+ определяются только элементарным составом и относительным содержанием изотопов элементов, входящих в состав исследуемого вещества. Распознавание действующих веществ ХОП по мультиплетной (изотопной) структуре сигналов молекулярного иона оказывается успешным в тех случаях, когда интенсивность пика или группы пиков (мультиплета) моле-

кулярного иона достаточно высока. То есть для пиков I-II уровней интенсивностей, согласно классификации [2].

Результаты расчета интенсивностей сигналов мультиплетов M^+ для молекул, содержащих до восьми

атомов хлора, сведены в табл. 1. Так как в состав молекул некоторых ХОП могут входить и атомы брома и серы, имеющие изотопный сигнал с приращением 2, то мы дополнили табл. 1 значениями интенсивностей для этих элементов.

Таблица 1. Расчетные интенсивности сигналов мультиплета молекулярного иона с различным содержанием атомов хлора, брома и серы в молекуле

N	Число атомов Cl, Br, S	$\sum m_i$	Положение и интенсивность пика в мультиплете							
			M^+	M^{+2}	M^{+4}	M^{+6}	M^{+8}	M^{+10}	M^{+12}	M^{+14}
1	Cl	35	100.0	32.0						
2	Cl ₂	70	100.0	65.0	11.0					
3	Cl ₃	105	100.0	97.0	31.0	3.0				
4	Cl ₄	140	77.0	100.0	49.0	11.0	1.0			
5	Cl ₅	175	63.0	100.0	64.0	20.0	3.0	0,2		
6	Cl ₆	210	52.0	100.0	88.0	34.0	8.0	1.0	0.05	
7	Cl ₇	245	45.0	100.0	96.0	51.0	16.0	3.0	0.3	0.02
8	Cl ₈	280	35.0	89.0	100.0	64.0	26.0	7.0	1.0	0.1*
9	Br	79	100.0	97.0						
10	Br ₂	158	51.0	100.0	49.0					
11	Br ₃	237	34.0	100.0	98.0	32.0				
12	Br ₄	316	18.0	69.0	100.0	65.0	16.0			
13	ClBr	114	77.0	100.0	24.0					
14	Cl ₂ Br	149	61.0	100.0	46.0	6.0				
15	Cl ₃ Br	184	52.0	100.0	64.0	17.0	2.0			
16	ClBr ₂	193	44.0	100.0	69.0	13.0				
17	Cl ₂ Br ₂	228	39.0	100.0	89.0	31.0	4.0			
18	ClBr ₃	272	27.0	86.0	100.0	48.0	8.0			
19	S	32	100.0	4.0	0.02					
20	S ₂	64	100.0	9.0	0.2	0.002				
21	S ₃	96	100.0	13.0	1.0	0.01	0.001			
22	S ₄	128	100.0	18.0	1.0	0.04	0.001	0.0001		

* - интенсивности пика M^{+16} меньше 0.02% от максимального пика мультиплета и в таблице не приводятся, т.к. на практике не регистрируются.

В экспериментальном мультиплете M^+ наряду с сигналами с приращением +2 будут проявляться и сигналы с приращением +1, обусловленные наличием в составе молекул органических веществ атомов водорода, углерода, азота и кислорода. Однако, из-за того, что их интенсивность гораздо меньше, чем для рассматриваемых атомов галогенов и серы, при распознавании мультиплета их вкладом можно пренебречь. По сигналу M^{+1} определяется количество атомов углерода, входящих в состав исследуемой молекулы.

Сравнение результатов расчета с экспериментальными значениями интенсивностей (табл. 2) сигналов мультиплета M^+ для таких ХОП, как ДДТ ($C_{14}H_9Cl_5$), Альдрин ($C_{12}H_8Cl_6$), Гексахлоран ($C_6H_6Cl_6$), Гептахлор ($C_{10}H_5Cl_7$) и Хлордан ($C_{10}H_6Cl_8$), показывает малое (менее 1%) расхождение данных для теоретических изменений интенсивностей сигналов мультиплета. В экспериментальном спектре ДДТ мультиплет M^+ несколько отличается от теоретического с сохранением общего образа мультиплета.

Таблица 2. Экспериментальные интенсивности сигналов мультиплета* молекулярных ионов ХОП

Брутто-формула пестицида	Положение и интенсивность пика в мультиплете							
	M^+	M^{+2}	M^{+4}	M^{+6}	M^{+8}	M^{+10}	M^{+12}	M^{+14}
$C_{14}H_9Cl_5$	57.1	100.0	61.9	19.0	2.4	0.0		
$C_6H_6Cl_6$	52.0	100.0	80.0	32.0	8.0	0.0	0.0	
$C_{12}H_8Cl_6$	50.0	100.0	85.7	32.1	10.7	0.0	0.0	
$C_{10}H_5Cl_7$	44.5	100.0	96.2	51.5	16.6	3.2	0.35	0.017
$C_{10}H_6Cl_8$	29.4	92.9	100.0	64.7	23.5	0.0	0.0	0.0

*- указаны только сигналы с $\Delta m/z = 2$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Майстренко В.Н., Хамитов Р.З., Будников Г.К. Эколого-аналитический мониторинг супертоксикантов. – М.: Химия, 1996. 319 с.

2. Зенкевич И.Г., Иоффе Б.В. Интерпретация масс-спектров органических соединений Л.: Химия, 1986.- 176 с.