

**Развитие методов анализа и  
исследование состояния объектов  
окружающей среды Сибирского региона**

*кафедра аналитической химии и  
ИНХ им. А.В. Николаева СО РАН*

*КОКОВКИН Василий Васильевич*

К объектам окружающей среды относятся:

Воды (поверхностные и подземные, атмосферные осадки), снежный покров (там где он есть), почвенный покров, воздух, растительность и т.п. С позиций анализа эти объекты представляют собой сложные многокомпонентные многофазные неоднородные системы. Их состав определяется как природными процессами, так и антропогенным воздействием.

**Какие задачи применительно к объектам окружающей среды могут решать аналитики?**

Определение химического состава (элементного, фрагментного, молекулярного и т.п.), распределение состава в пространстве и во времени, установление соответствия определенным нормам и т.д.

## Методическое обеспечение:

- 1. Разработка схем анализа объектов**
- 2. Разработка методик анализа объектов**
3. Разработка стандартных образцов состава
4. Сбор и хранение образцов объектов

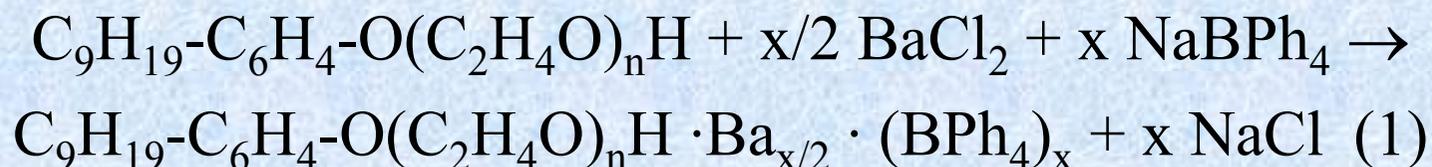
## Интерпретация результатов

**С использованием методов геофизики, метеорологии, гидрохимии и т.д.**

## Пример решения проблемы идентификации сложных аналитов в растворах на примере НП АВ

### *Определение НП АВ по оксиэтилатному фрагменту потенциометрическим методом*

Реакцию взаимодействия НП АВ с ТФБ можно записать в виде следующего уравнения:



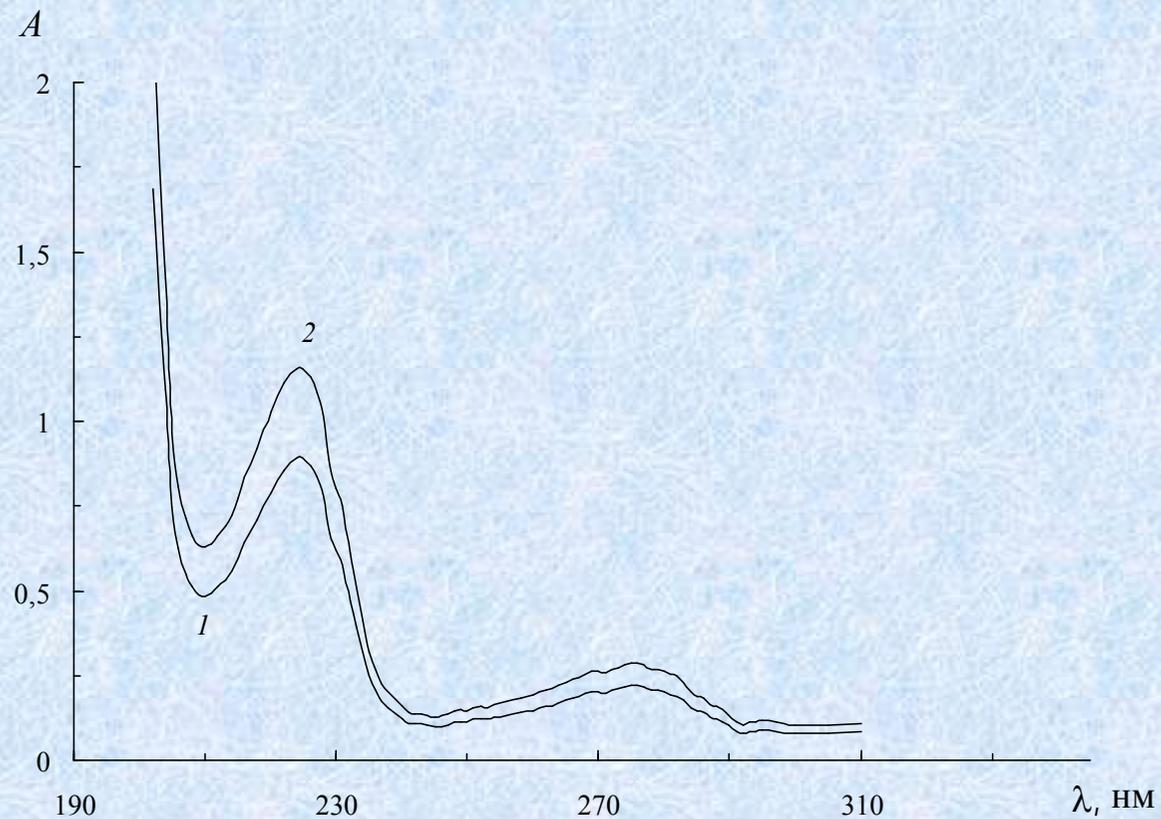
Здесь стехиометрические коэффициенты приведены в расчете на моль НП АВ.

$$C^{\text{BC}} = C \cdot (x/x^{\text{BC}}) \cdot (M^{\text{BC}}/M) \quad (\text{молярная концентрация})$$

$$q^{\text{BC}} = q \cdot (x/x^{\text{BC}}) \cdot (M^{\text{BC}}/M) \quad (\text{мольное количество})$$

*Коковкин В.В., Савинцева С.А., Лавренова Л.Г. Определение оксиэтилированных ПАВ по функциональным фрагментам групповыми методами анализа с использованием единого вещества сравнения // Журнал аналитической химии. 2008. Т. 63. Вып. 4. С.354–362.*

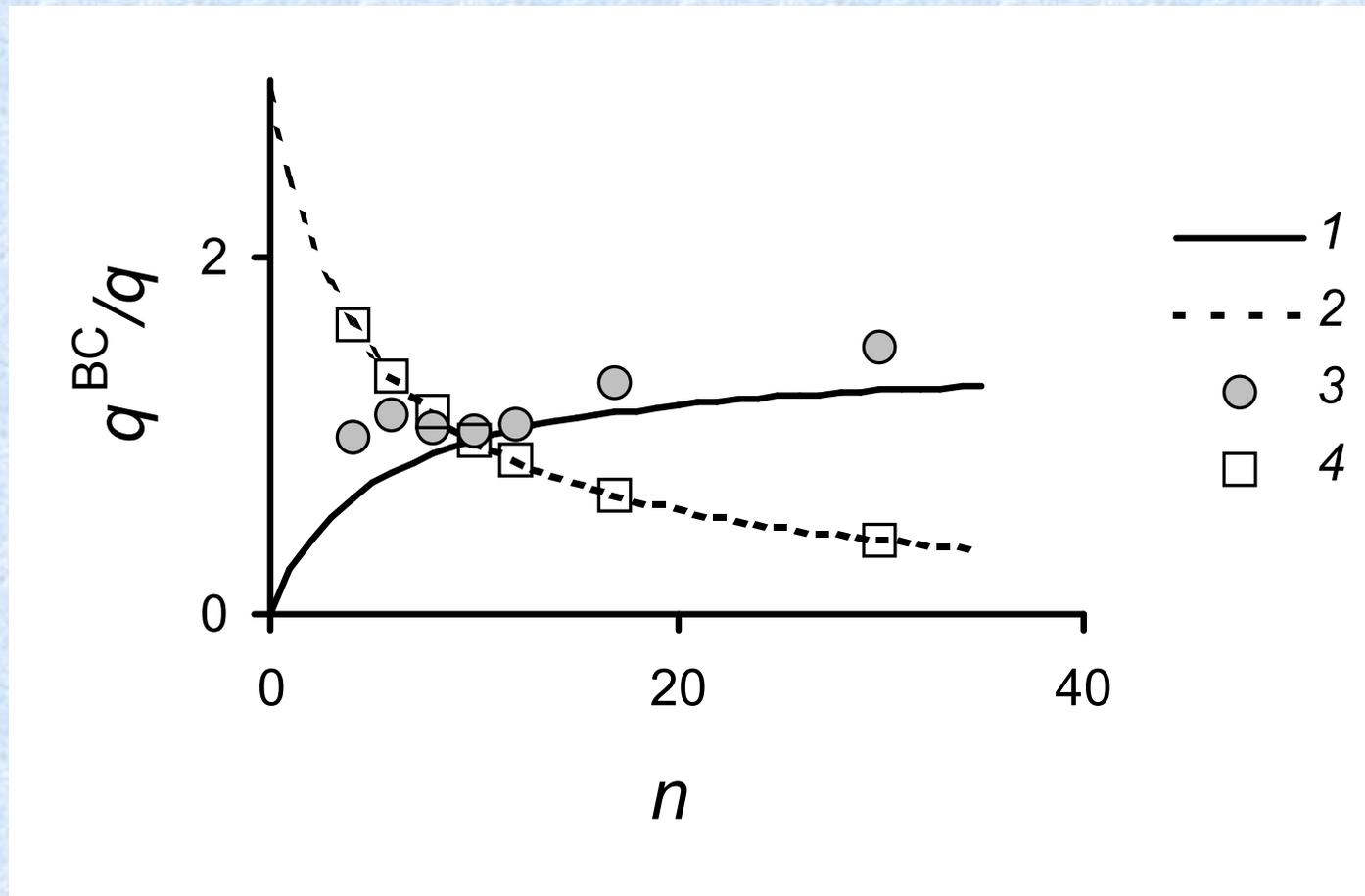
## Определение НП АВ по гидрофобному (фенильному) фрагменту фотометрическим методом



$$C^{BC} = C \cdot (M^{BC}/M) \text{ (молярная концентрация)}$$

$$q^{BC} = q \cdot (M^{BC}/M) \text{ (мольное количество)}$$

## Результат определения



Титрование: 1- расчет, 3– эксперимент, УФ-  
определение: 2- расчет, 4– эксперимент

Таблица 3. Результаты определения НП АВ методами потенциометрического титрования (I) и спектрофотометрии (II) при использовании вещества сравнения и пересчет данных для исключения систематической погрешности

Наименование НП АВ	Задано, мг	Найдено в расчете на тритон X-100 (мг)		Пересчет данных					
		I $\frac{q_1}{q_2}$ $f=5, P=0.95$	II $\frac{q_1}{q_2}$ $f=5, P=0.95$	$\frac{q_1}{q_2}$	$x$	$n$	Молярная масса		$q$ , мг
							найдено	задано	найдено
АФ <sub>9</sub> -6	74.0	82 ± 6	98 ± 6	0.83	1.3	6.0	484	485	74.0
АФ <sub>9</sub> -10	51.3	52.0 ± 2.8	50.5 ± 2.5	1.03	1.6	9.7	647	661	50.7
АФ <sub>9</sub> -17	15.9	20.6 ± 1.0	10.6 ± 0.5	1.94	3.03	17	968	969	15.9

# Анализ снежного покрова и воздуха

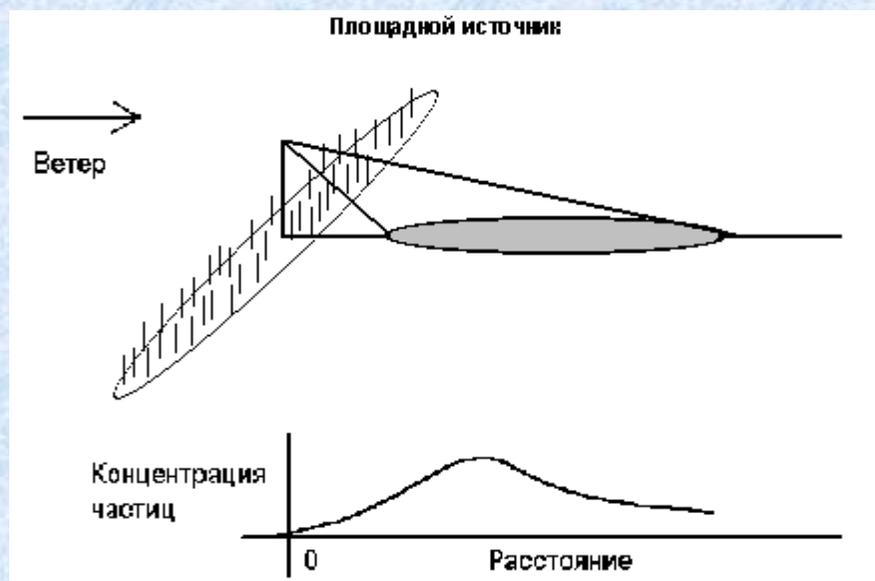
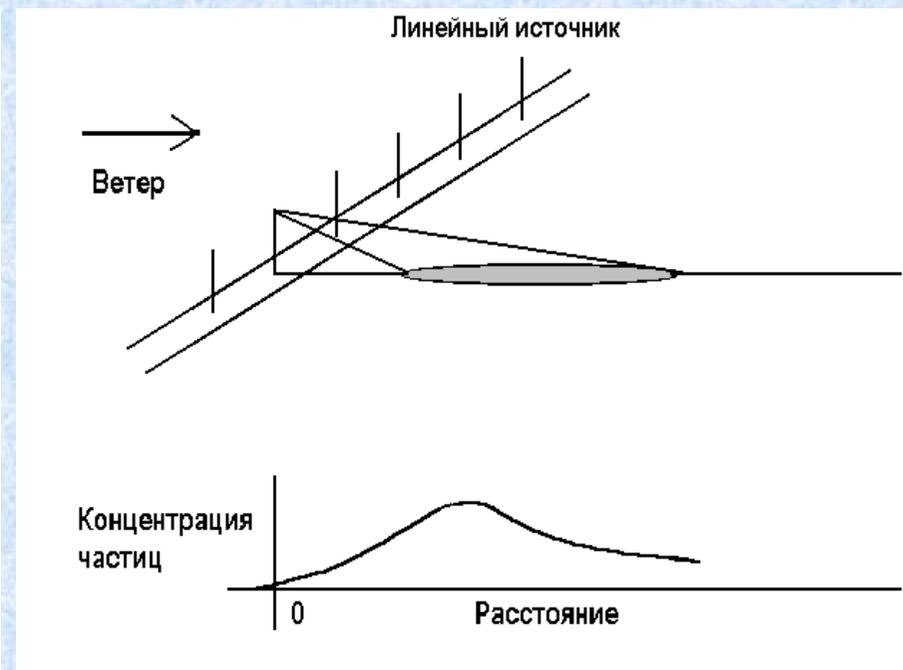
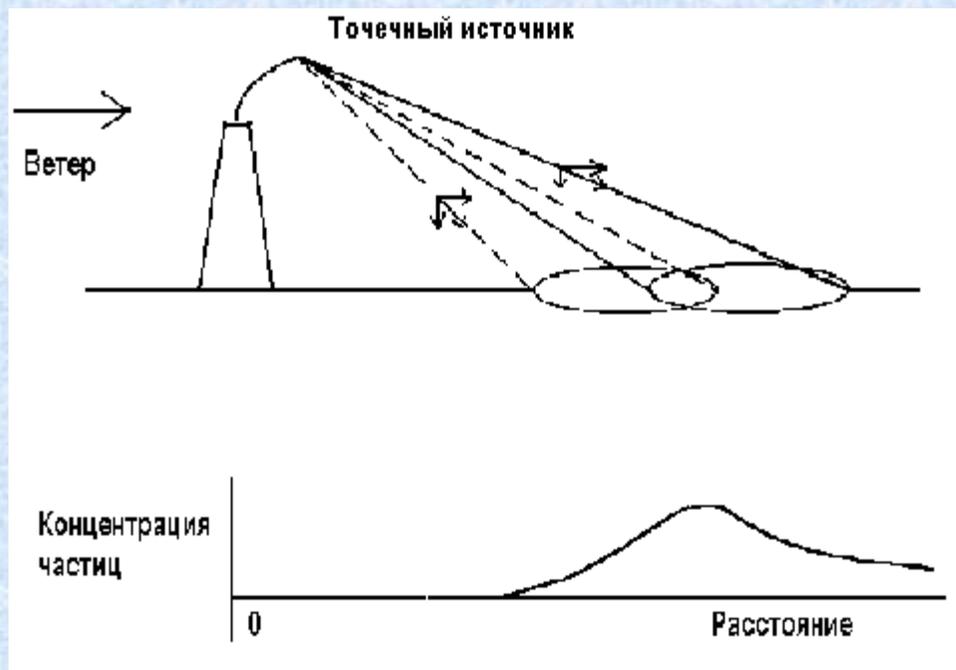
## Список контролируемых источников и детектируемых параметров

№ п/п	Отрасль н/х	Группа предприятий	Тип выброса	Вид выброса	Детектируемые компоненты
1.	Топливо-энергетический комплекс	Угольные котельные	Воздушные	Газовые и аэрозольные	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> , NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> , ПАУ, Микроэлементы (Zn, Fe, Mn, Al, Pb, Cd, )
		Угольные ТЭС			
		Угольные ТЭЦ			
2.	Автотранспорт	Дизельные двигатели	Воздушные	Отработанные газы, испарение топливной системы, пыль колес	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> , NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> , ПАУ, Микроэлементы (Pb, Cd, Zn, Cu, Ni и др.)
		Бензиновые двигатели			
3.	Промышленные предприятия	Химические	Воздушные	Вентиляционные, выбросы цехов отжига и др.	Детектирование элементов-трассеров, характеризующих источник (As, Sn, In и др.)
		Металлургические			
		ГОК			
4.	Жилищно-коммунальный	Жилой	Воздушные	Вентиляционные	Микробиологические, белок

## Объекты химического анализа

Объект анализа	Особенности отбора проб	Особенности химического состава	Определяемые компоненты
Снежный покров	На всю глубину покрова	Основа - $H_2O$ > 99%	Макро- и микрокомпоненты
Почва	На глубину 2-5 см	Основа $SiO_2$ – 60-80% $Al_2O_3$ – 10-20% $Fe_2O_3$ – до 5% $CaO$ – 5-10%	Микро-элементы
Воздух	Сорбция компонентов на сорбент	Сорбция углеводородов	УВ

# Схема осаждения пыли, выбрасываемых воздушными источниками трех основных типов



## Математические модели распространения аэрозольной примеси в атмосфере

Для описания распространения аэрозольной примеси в локальном и региональном масштабах используются полуэмпирические выражения, полученные в предположении, что аэрозольные частицы однородны и имеют сферическую форму.

Вид аналитической зависимости  $q_i(r) = A_i \cdot e^{\frac{-b_i}{r}} \cdot r^{-v_i}$ , где A, b, v - задаваемые параметры функции распределения.

У нас исходным пунктом для построения моделей восстановления загрязнения снега и почвы по данным наблюдений концентраций является соотношение

$$\bar{q}_{\bar{\tau}} = \int_0^{\infty} q \rho_{\tau, \bar{\tau}}(q) dq$$

Значения q могут быть найдены на основании решений стационарного уравнения турбулентной диффузии

$$u \cdot \frac{\partial q}{\partial x} - w \cdot \frac{\partial q}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial y} K_y \frac{\partial q}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} K_z \frac{\partial q}{\partial z} + Q \delta(x) \delta(y) \delta(z-H)$$

### Точечный источник

Для невесомой примеси

$$\Phi(r, \varphi) = \theta_1 [P(\varphi + 180^\circ) / r^2] \exp(-\theta_2 / r)$$

Для оседающей примеси

$$\Phi_w(r, \varphi) = \theta_{1w} [P(\varphi + 180^\circ) / r^{2+w}] \exp(-\theta_{2w} / r)$$

## Линейный источник

При равномерно распределенной эмиссии вдоль линейного источника

$$q(x, \theta) = (\theta_1 / x^{\theta_2}) \cdot \exp(-x_{\max} / x)$$

## Площадной источник

$$q(x, y) = \frac{\theta \cdot P(\arctg \frac{y - \mu}{x - \lambda} + 180^\circ)}{\sqrt{(x - \lambda)^2 + (y - \mu)^2}}$$

$(\xi, \eta)$  – текущие координаты точечного источника,  $(\xi, \eta) \in S$ ,  $m(\xi, \eta)$  - эмиссия примеси,  $P(\varphi)$  – роза ветров в пограничном слое атмосферы за рассматриваемый промежуток времени,  $u$  и  $H$  – средняя скорость ветра и высота слоя перемешивания.

$$\theta = \frac{M}{2\pi u H}$$

$$M = \iint_S m(\xi, \eta) d\xi d\eta$$

## Пробоотбор

В силу нелинейной зависимости  $q(\vec{x}, \vec{\theta})$  от  $\vec{\theta}$  априорное построение оптимального плана измерений, вообще говоря, невозможно. Поэтому при математическом анализе ситуации ограничиваются нахождением локально-оптимальных планов с помощью процедур последовательного анализа и планирования наблюдений.

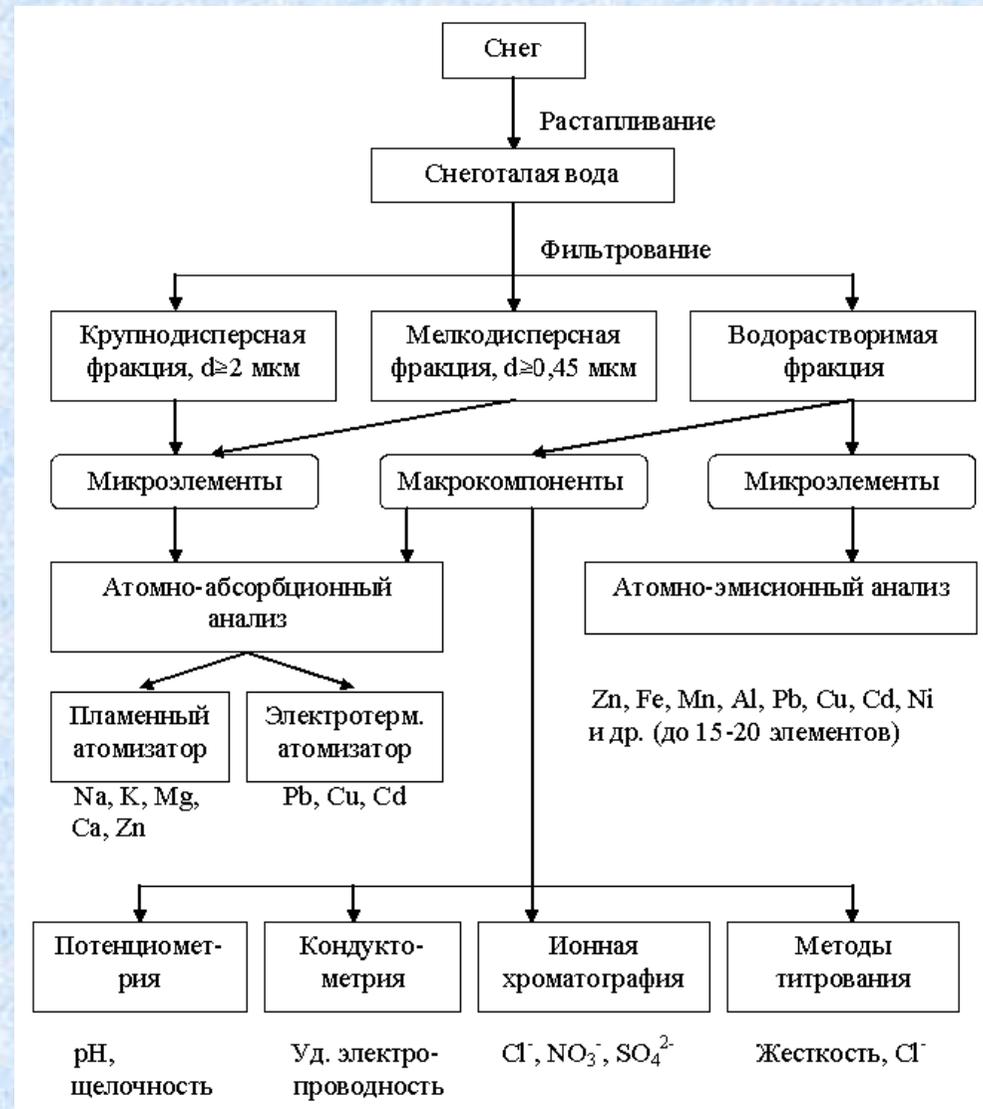
На практике это приводит к двухэтапной схеме пробоотбора при обследовании источника.

- 1 этап. Отбор проб для построения предварительной модели.
- 2 этап. Отбор проб для уточнения параметров модели.

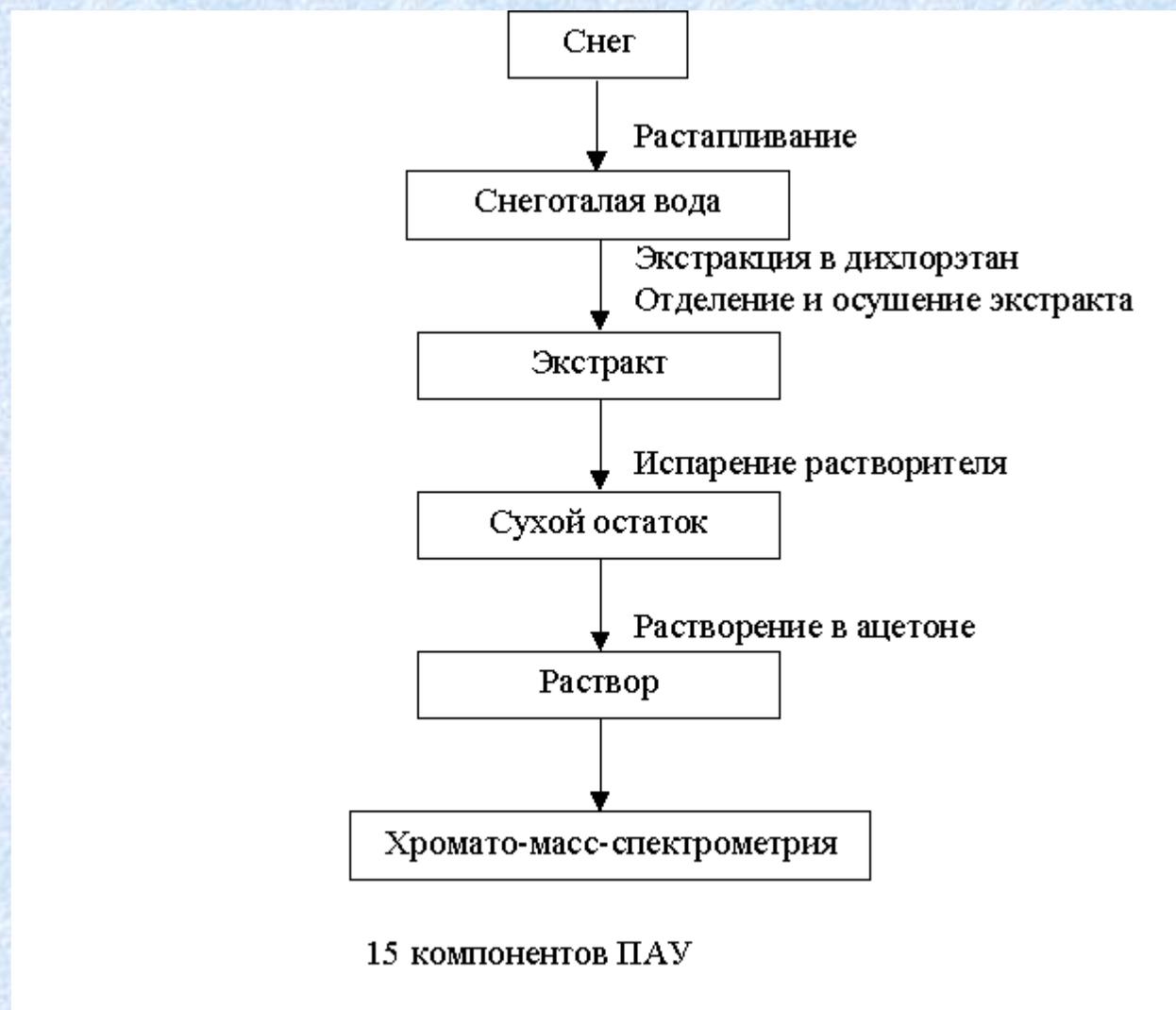
Маршруты отбора проб от источника определяются направлением господствующих ветров в обследуемой местности. Вклад направления, как правило, зависит от доли ветров.

Если источник обследован, в последующем можно обойтись схемой пробоотбора с минимальным числом точек отбора проб для расчетов параметров модели распространения примеси.

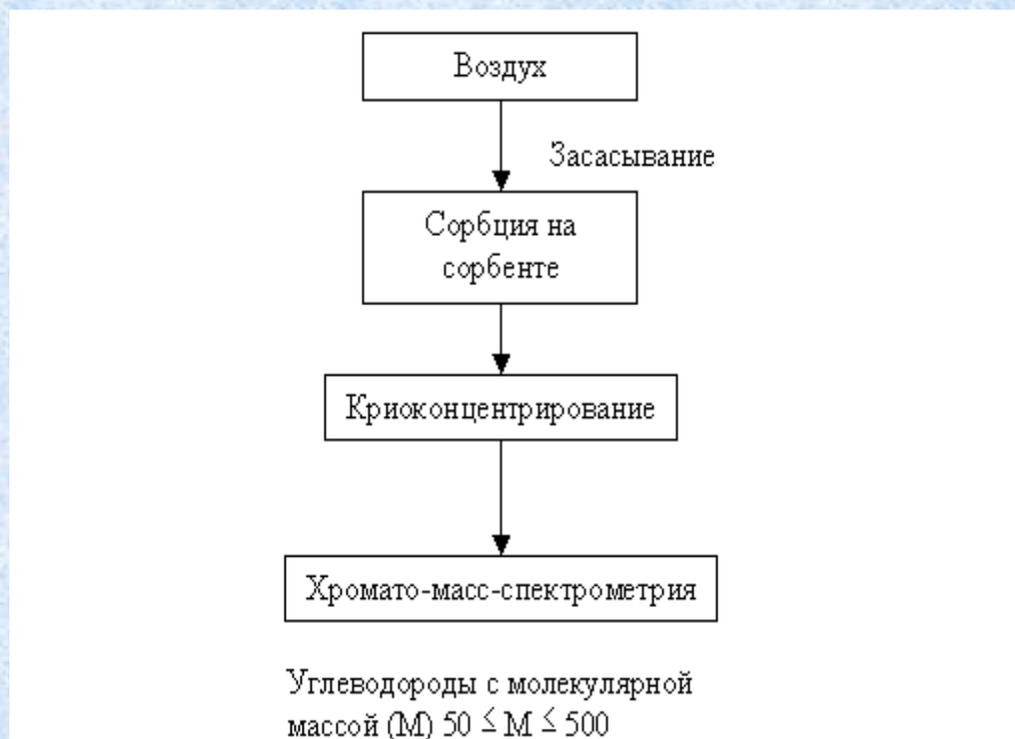
## Схема определения неорганических компонентов в пробе снега



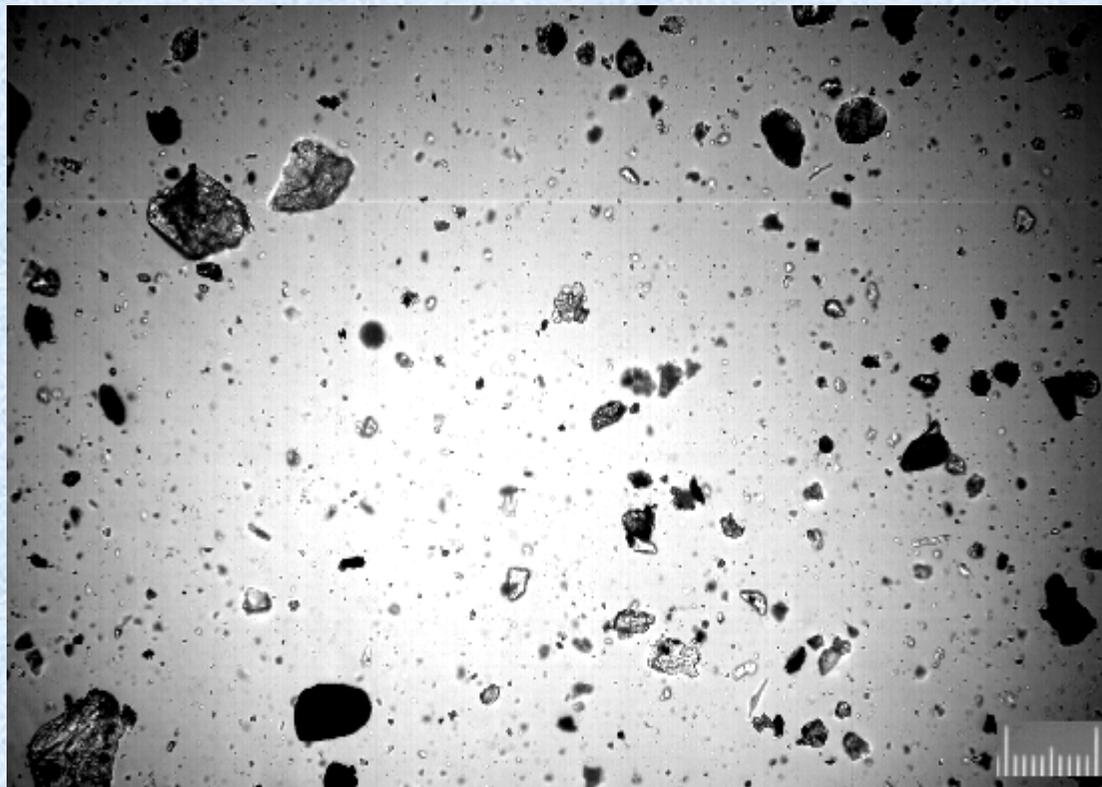
## Схема определения компонентов ПАУ в пробе снега



## Схема определения компонентов воздушных проб

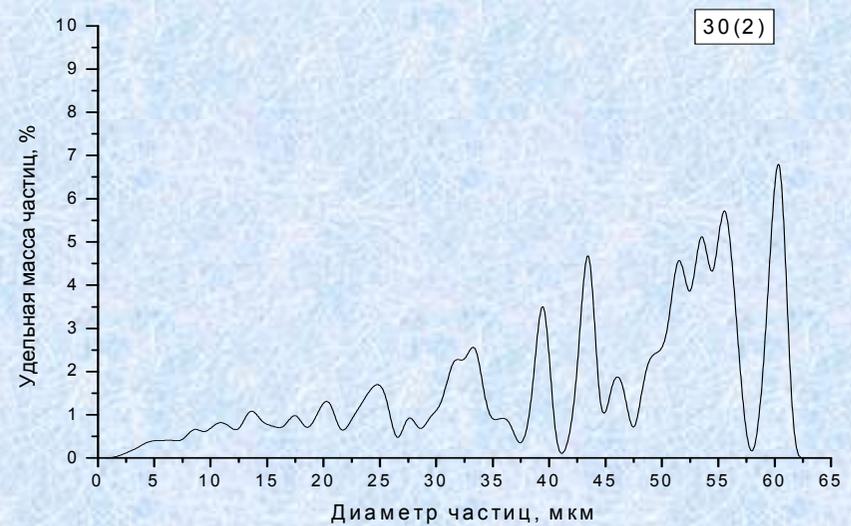
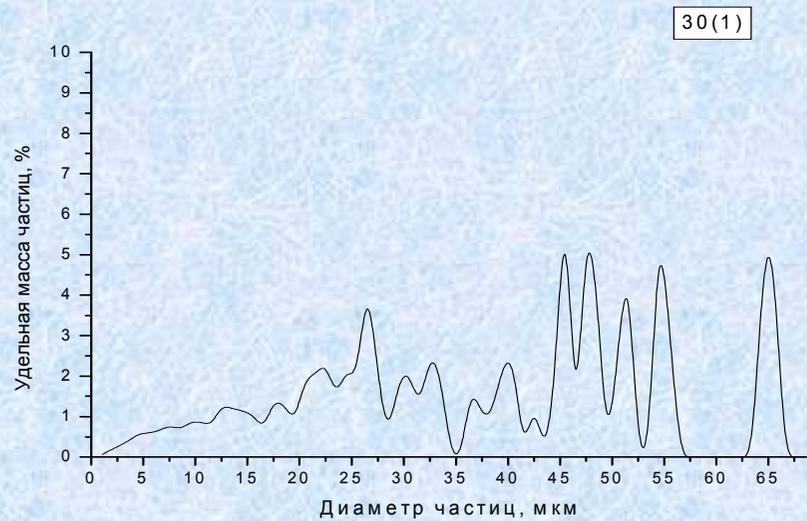


# **Некоторые результаты**



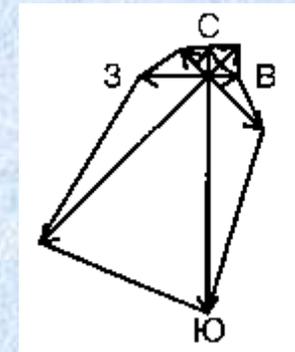
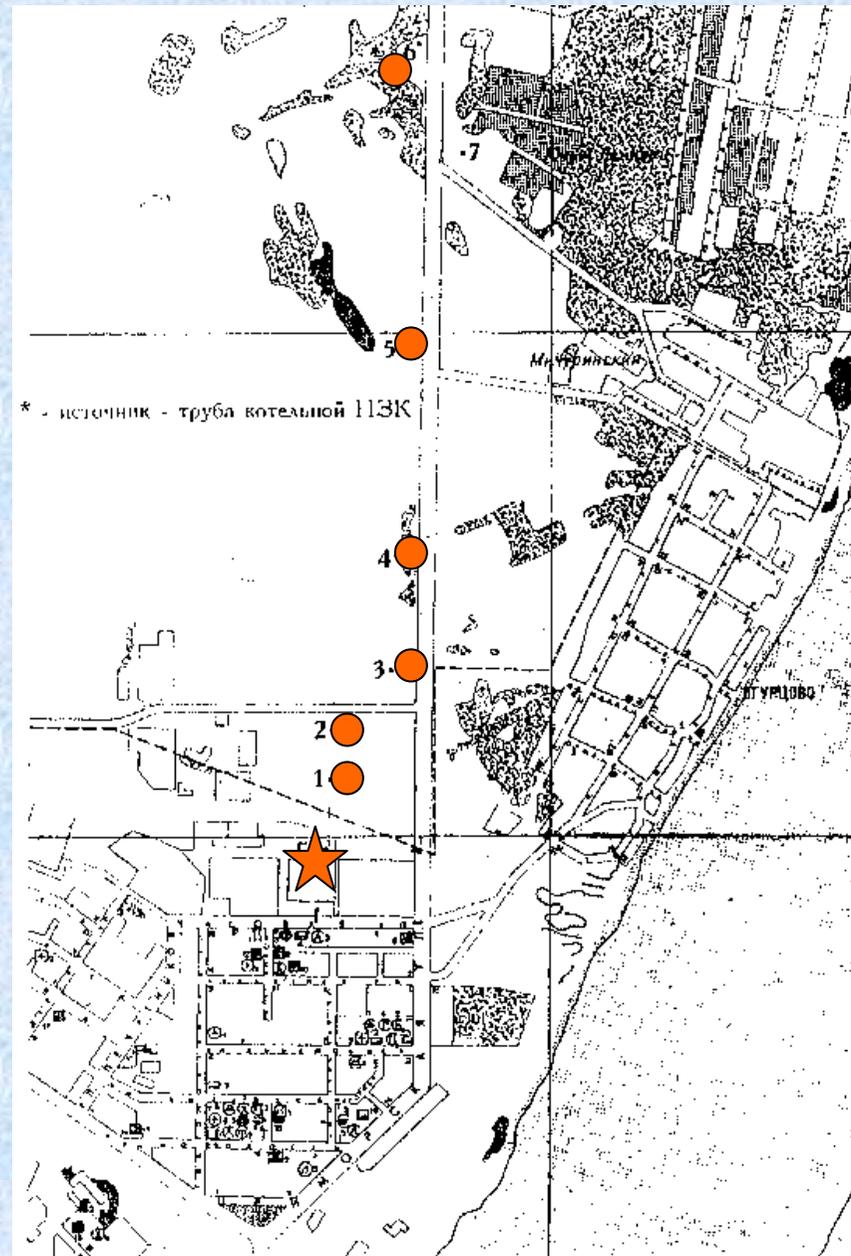
100 мкм

Фотография части крупнодисперсного осадка пробы, отобранной, на расстоянии 30 метров от автотрассы. Увеличение  $\times 100$ .



Спектр размеров частиц грубодисперсного осадка в интервале 5-75 мкм для образцов, отобранных на расстоянии 30 метров от автотрассы.

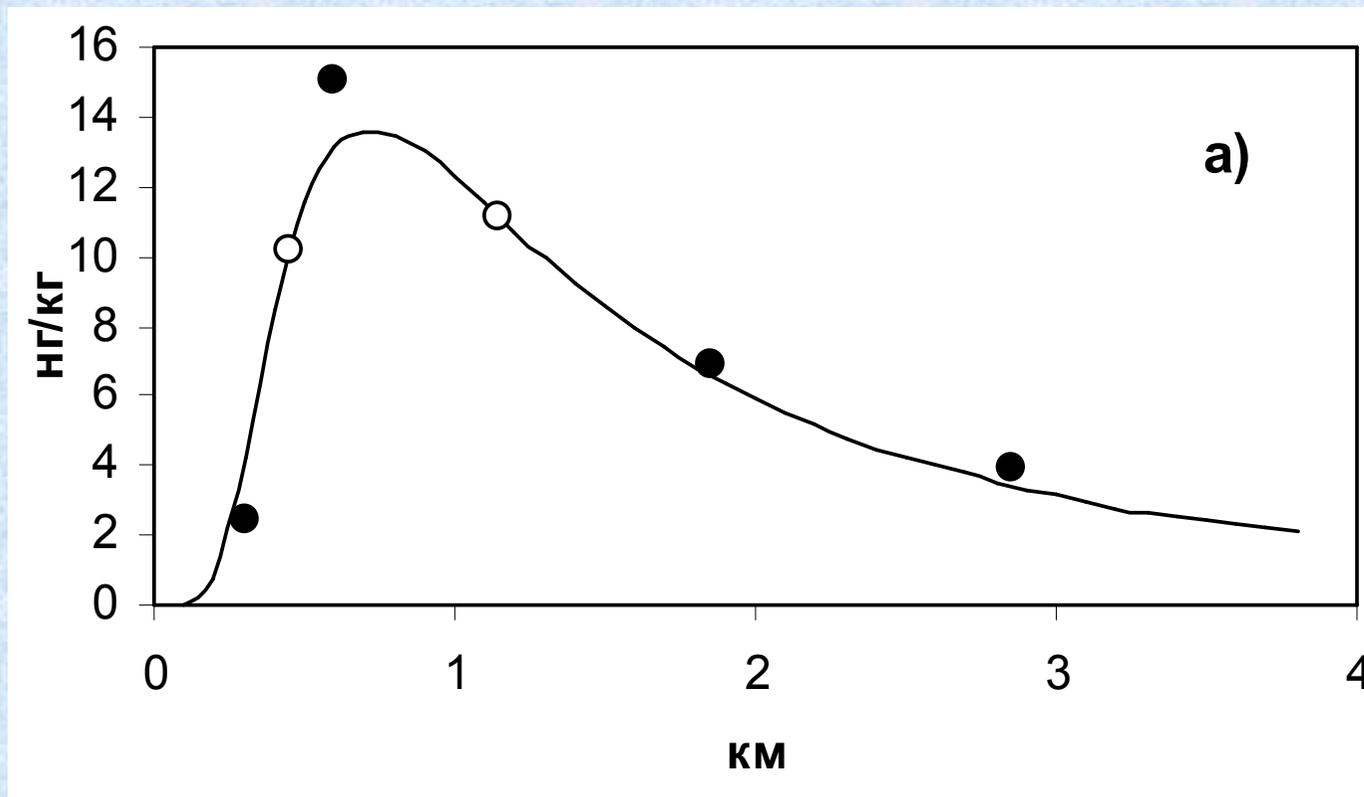
# Угольная котельная НЗК



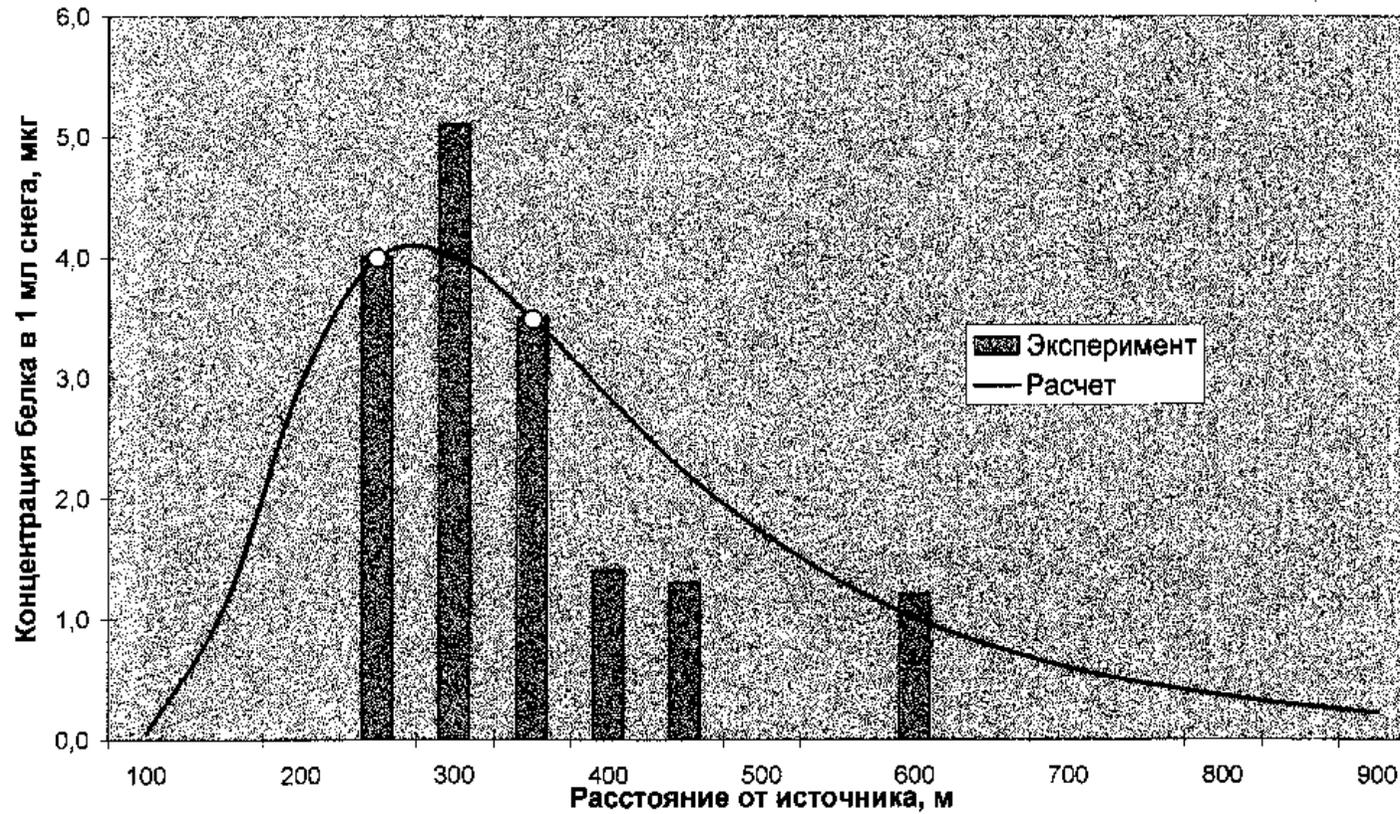
## Оценки параметров модели $\theta_1$ и $\theta_2$ и суммарного выпадения для ПАУ

Компонент	$\theta_1$	$\theta_2$	Молекулярная масса	Суммарное выпадение, г
Нафталин	1300	6,35	128	4,8
Аценафтаден	392	6,25	152	0,50
Аценафтен	112	5,2	154	0,87
Флуорен	982	4,48	166	3,1
Антрацен	225	3,47	178	5,5
Фенантрен	3240	3,32	178	8,6
Пирен	963	2,66	202	3,3
Флуорантен	2000	2,63	202	7,0
Бенз(а)антрацен	91	2,39	228	33
Хризен	176	2,24	228	78
Бенз(б)флуорантен	118	2,3	252	5,2
Бенз(а)пирен	61	2,21	252	22
Перилен	14	2,0	252	3,1
Дибенз(а,к)антрацен	9,2	2,12	278	19
Бенз(ghi)перилен	77	2,0	276	67

Удельное содержание бенз(а)пирена (мкг/л) в снеге на маршруте к северу от НЭЗ (а); восстановленное поле концентраций бенз(а)пирена (мкг/кг) в почве (б). О - опорные, ● - контрольные точки, — - результат численного моделирования.



### Расчеты осаждения белка при удалении от источника





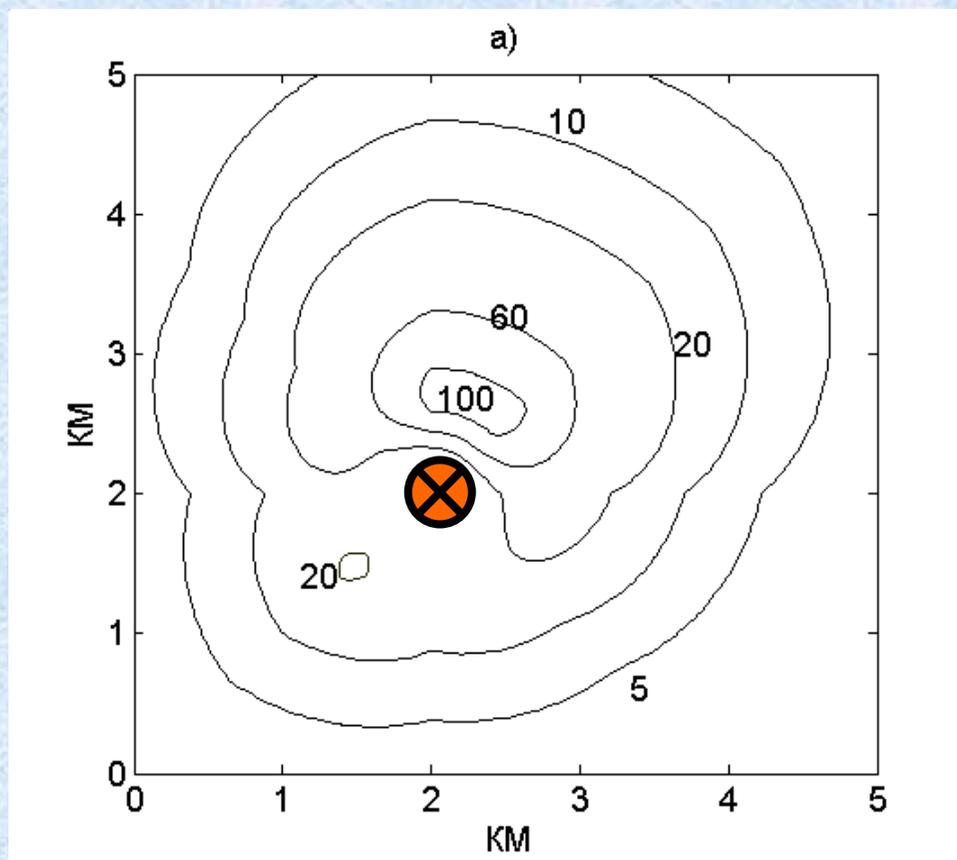
# Новосибирский оловокомбинат



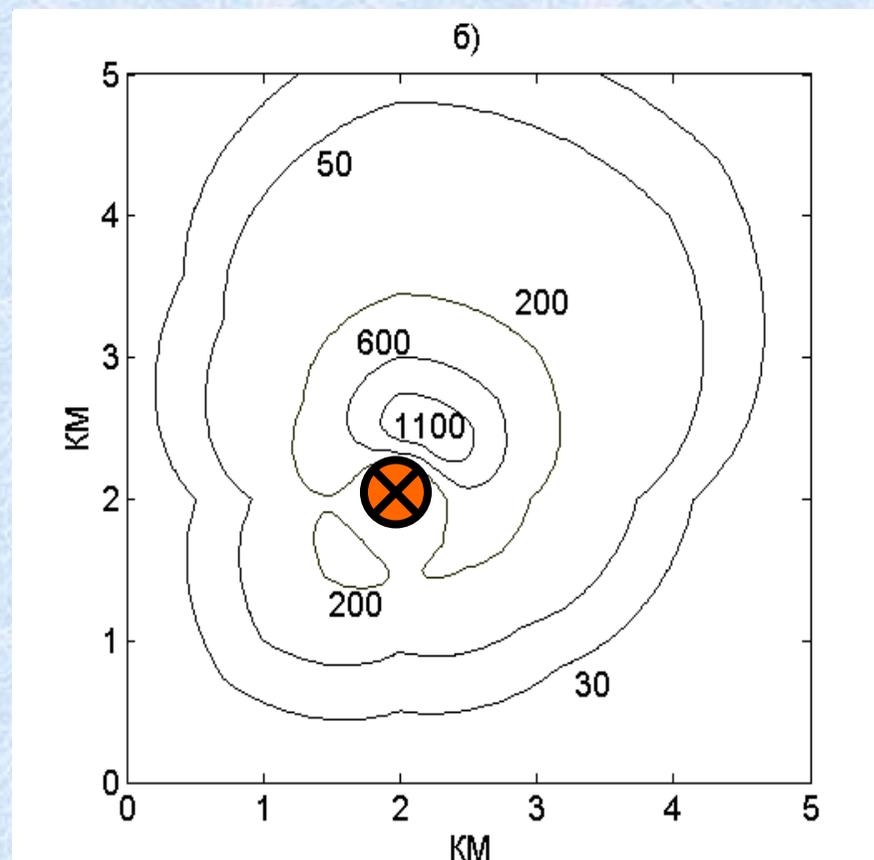
Схема пробоотбора

## Концентрации мышьяка (мкг/кг) в снеге

1995

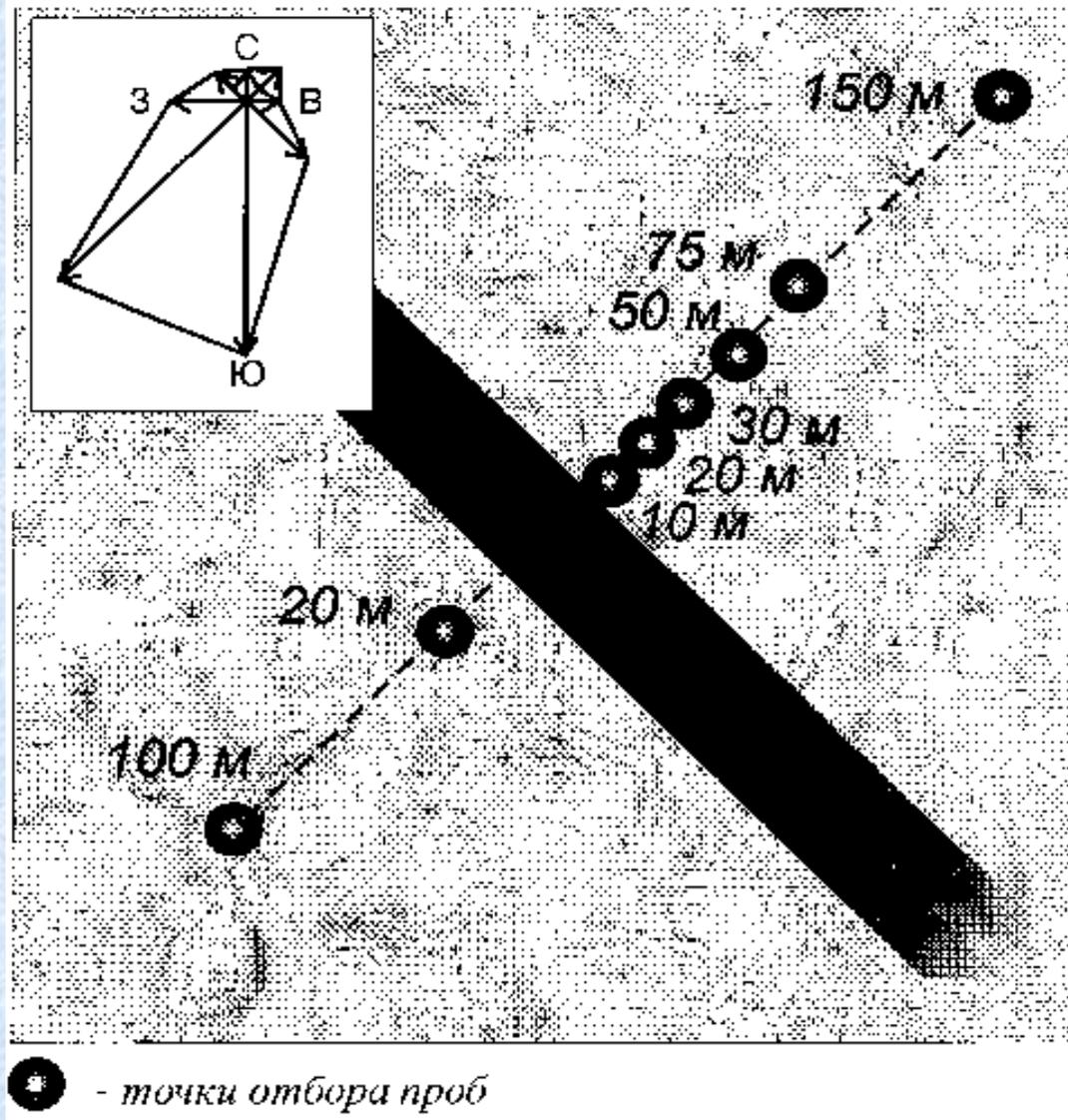


2001

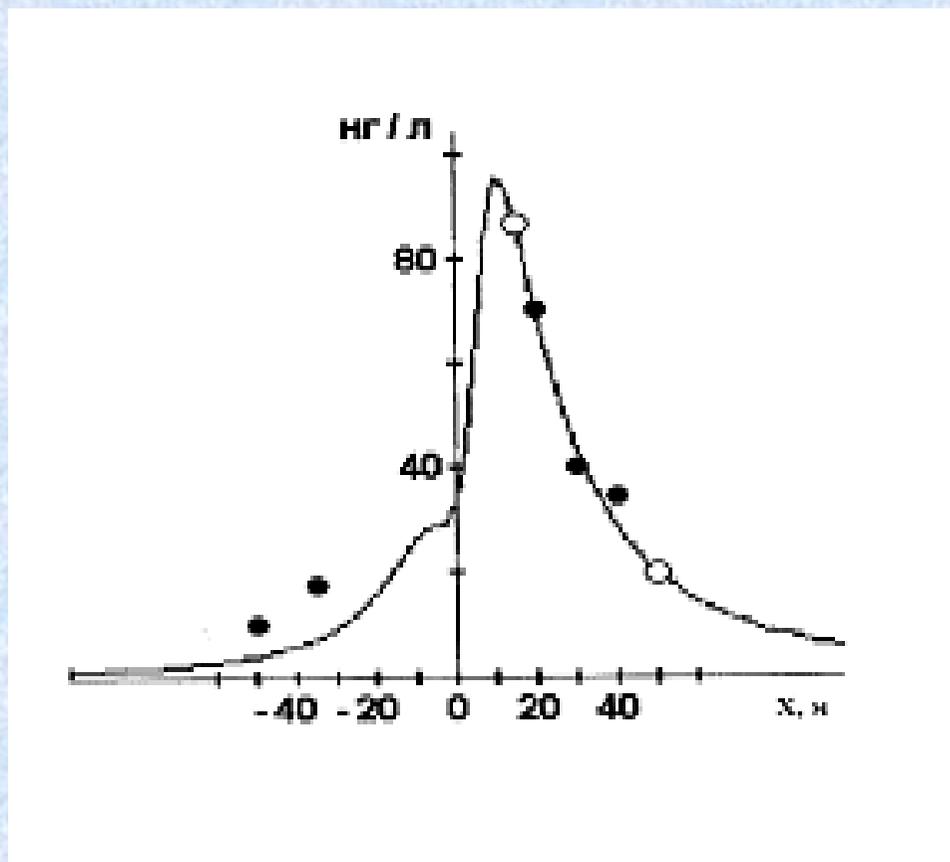


# Схема участка Советского шоссе г. Новосибирска

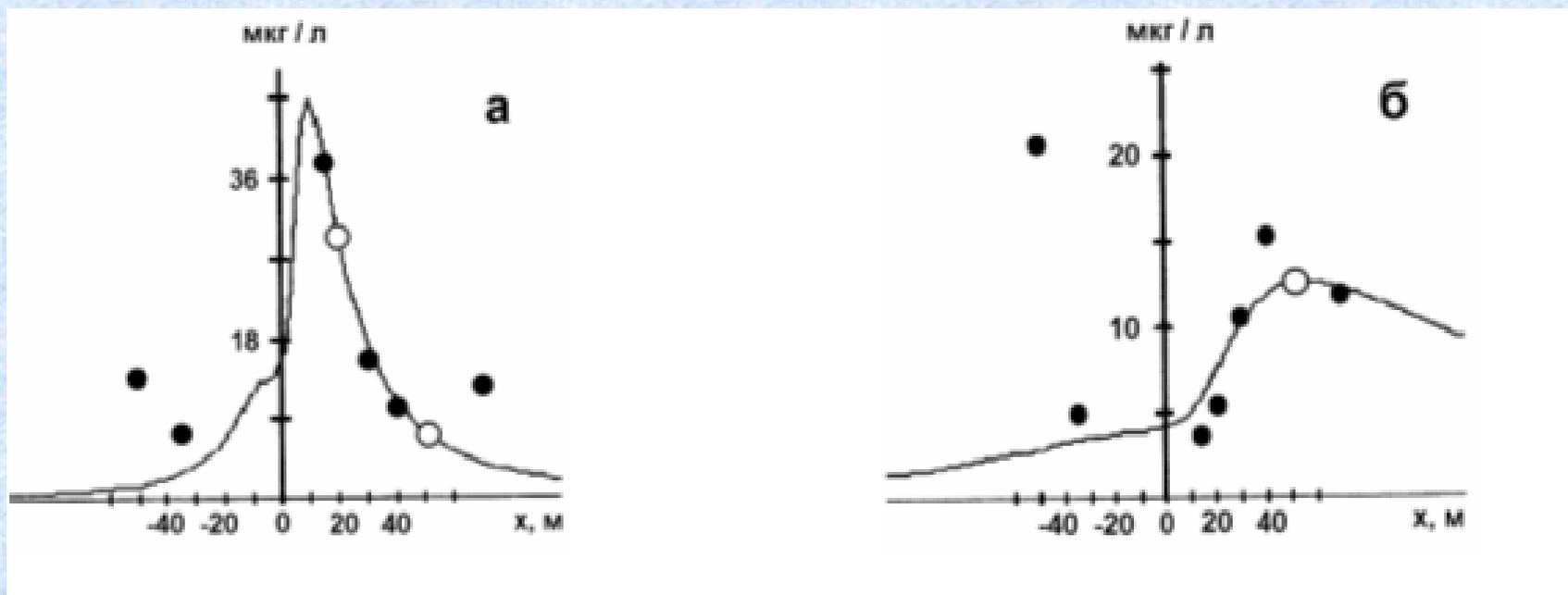
## Схема местности отбора проб



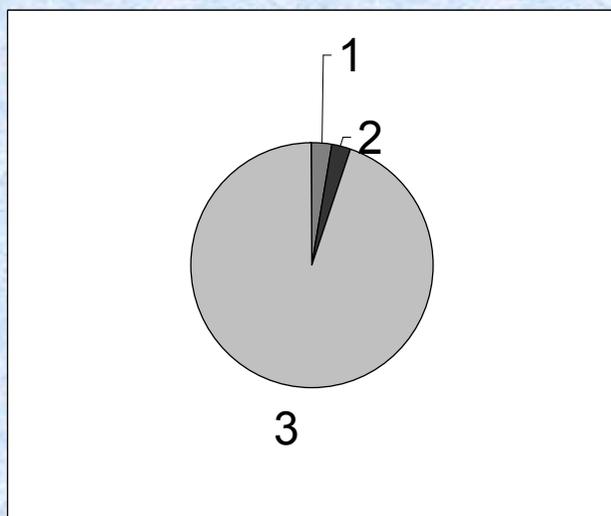
## Рассчитанное и измеренное удельное содержание в снеге бенз(а)пирена для Советского шоссе



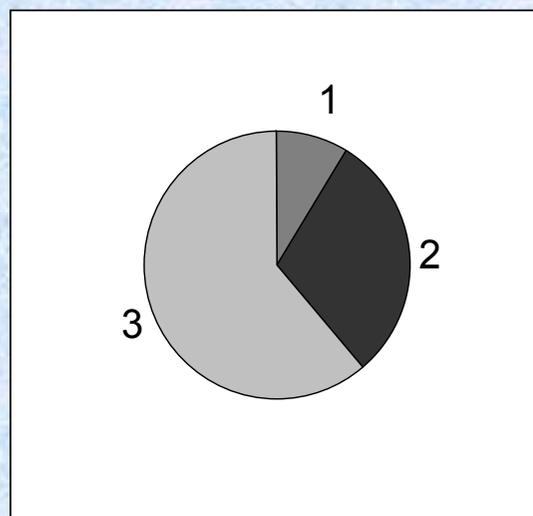
**Удельное содержание свинца в крупнодисперсной части (а) и суммарно в мелкодисперсной и водорастворенной частях (б).**



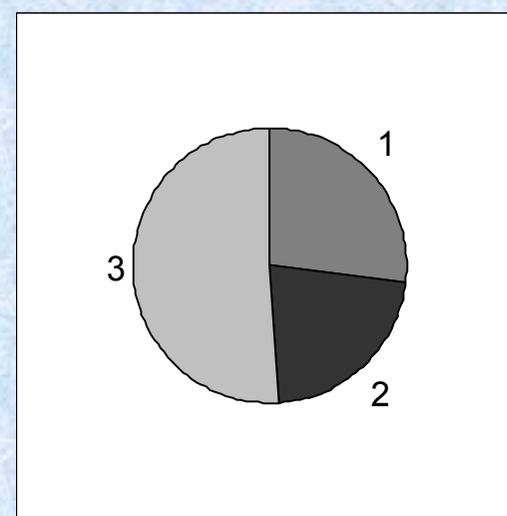
1998-1999



1999-2000



2000-2001



Распределение в снеге вблизи автомагистрали свинца: в водорастворенной (1), мелкой (2) и крупнодисперсной (3) фракциях.

## Оценки суммарных выпадений и относительных скоростей оседания ПАУ

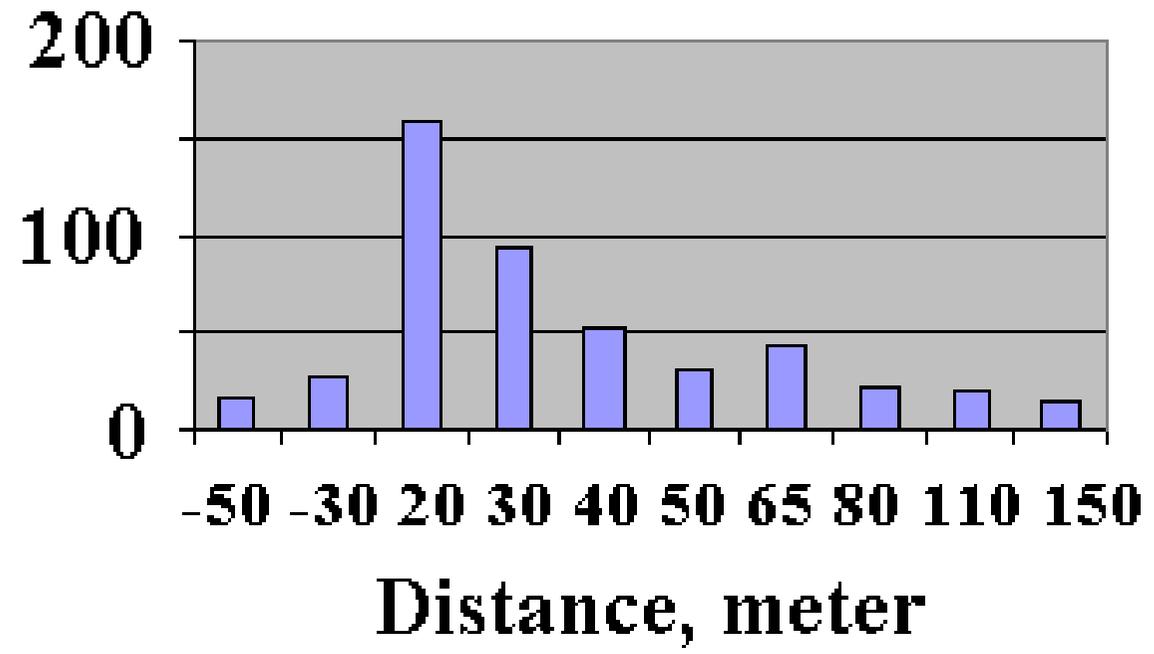
ПАУ	Оценка $\theta_2$		Оценка выпадений, $M$ , г/км		Скорость относительного оседания $\lambda$
	1999 г.	2000 г.	1999 г.	2000 г.	
Бенз(а)пирен	1,27	3,6	0,16	0,55	9,6
Флуорантен	1,45	4,08	1,2	1,9	7
Пирен	1,72	4,2	0,6	1,5	4,4

Примечание: Скорость относительного оседания вычислялась по формуле  $\lambda = \frac{\theta_2^{**} - 1}{\theta_2^* - 1}$

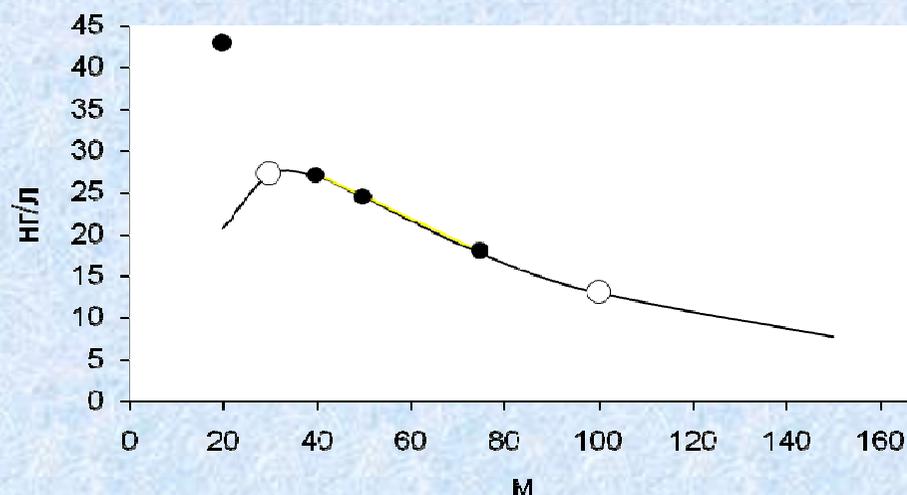
где  $\theta_2^*$ ,  $\theta_2^{**}$  - оценки параметра для зимних сезонов 1999 и 2000 гг. соответственно

## 2007-2008 winter season

### Benzo(a)pyrene concentration change ng/liter

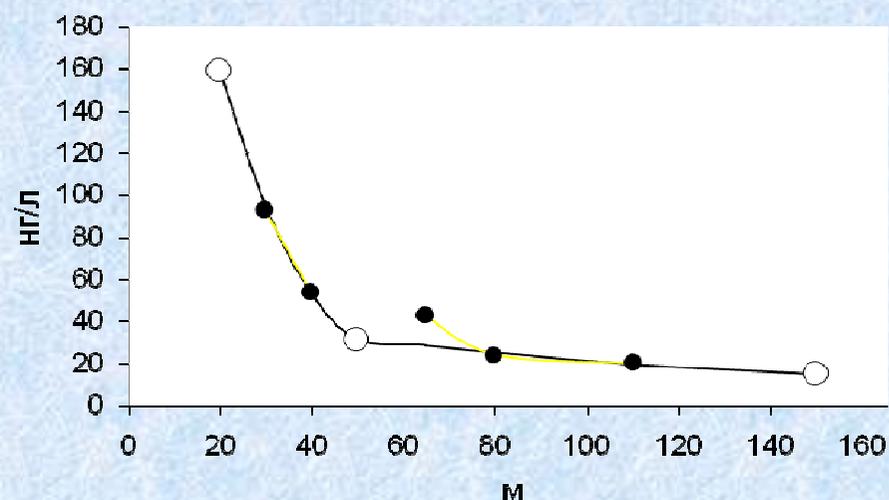


**Бенз(а)пирен - 2004**



Восстановленные аэрозольные выпадения БП в окрестности автотрассы в зимнем сезоне 2003-2004 г.г.

**Бенз(а)пирен - 2008**



Восстановленные аэрозольные выпадения БП в окрестности автотрассы в зимнем сезоне 2007-2008 г.г.

# Площадной источник: г. Искитим Новосибирской области

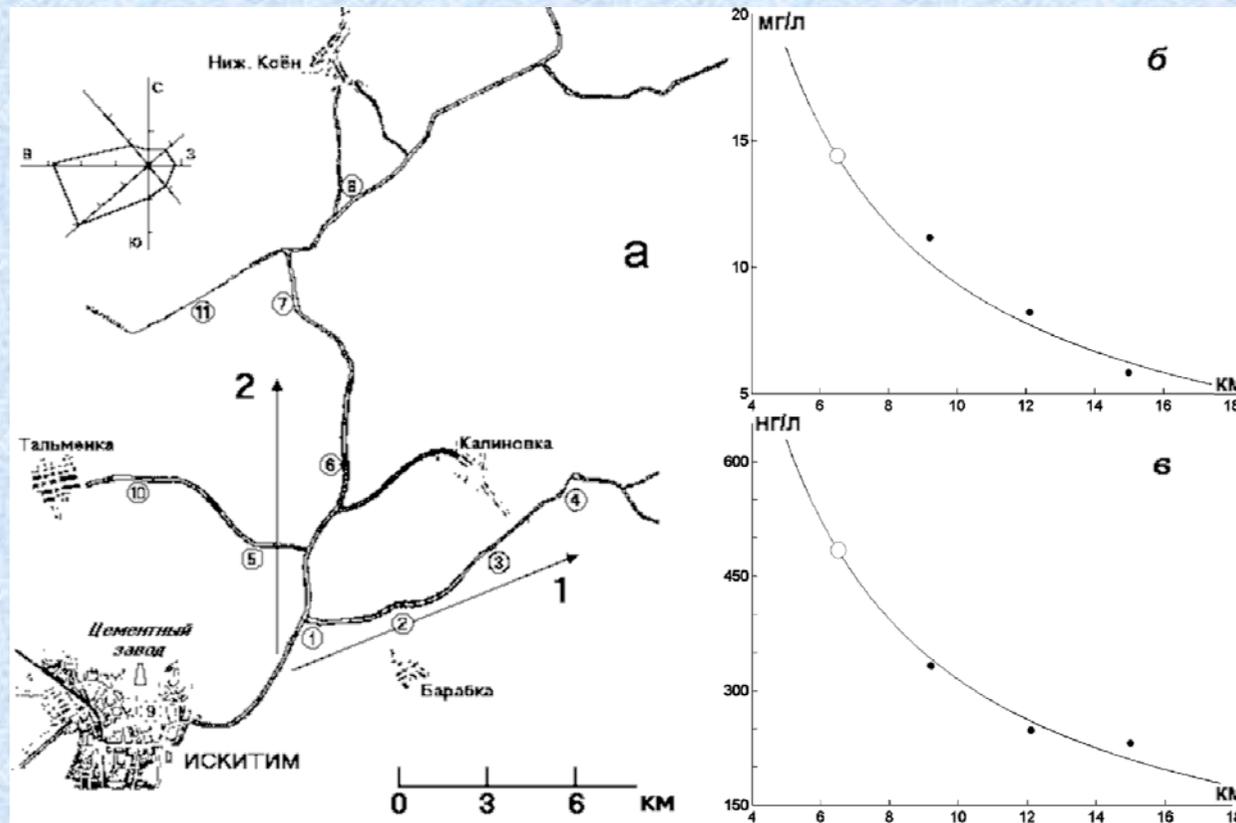


Схема маршрутных снегоръемок (а). Восстановленное и измеренное на маршруте 1 удельное содержание пыли (б), суммы ПАУ (в).

Изучение состава и качества источников  
питьевых вод в различных регионах  
Западной и Восточной Сибири

## Исследование качества питьевых вод в г. Новосибирске

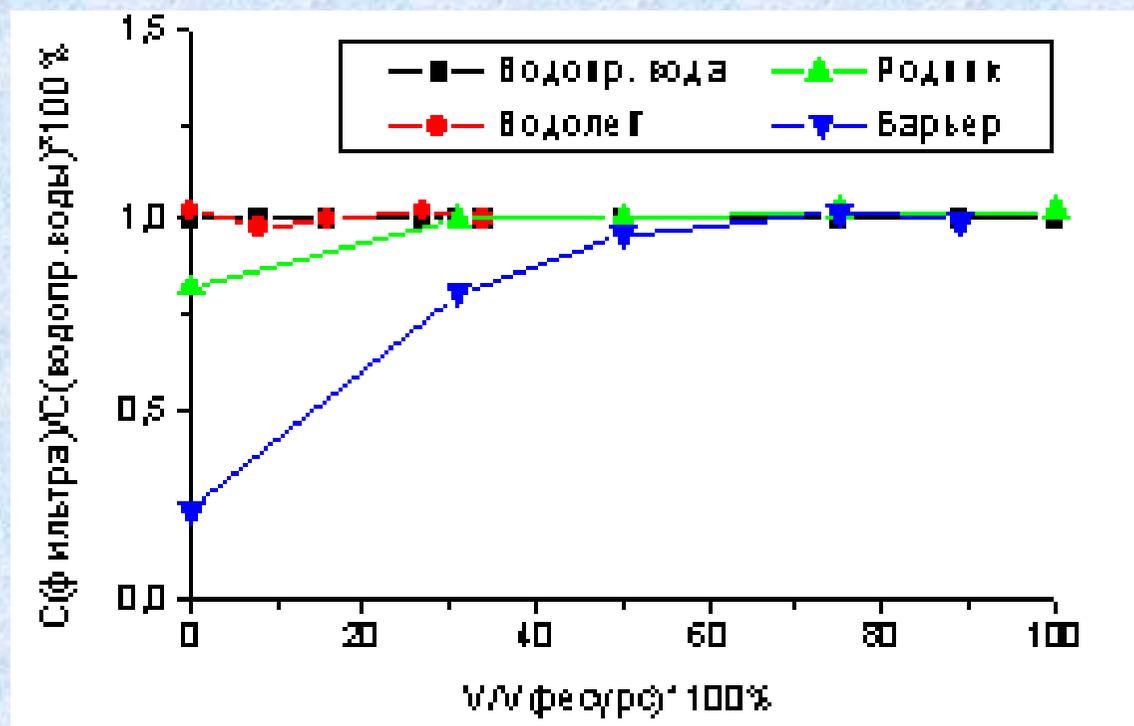


Испытательный стенд

## Технические характеристики исследуемых фильтров

Наименование фильтра	Тип фильтра	Состав	Ресурс	Наименование фильтра	Тип фильтра	Состав	Ресурс
1	2	3	4	5	6	7	8
Фильтры первой группы (с сорбционно-ионообменной очисткой)				Фильтры второй группы (с сорбционно-фильтрующим действием и электрохимической очисткой)			
Брита	Кувшин	Обработанный серебром активированный уголь	126л	Аквафор	Насадка на кран	Сорбенты	1000 л
<b>Барьер</b>	<i>Кувшин</i>	<i>Высококачественная ионообменная гранулированная смола в H<sup>+</sup>-форме</i>	<i>350л</i>	Instarure	Насадка на кран	Активированный уголь	760 л
Гейзер	Насадка на кран	Ионообменный фильтропатрон. Угольный фильтр	2000 л	<b>Родник</b>	<i>Насадка на кран</i>	<i>Активированный уголь, частично импрегнированный серебром</i>	<i>1800л</i>
Арго	Насадка на кран	Цеолит природный. Уголь древесный активный, импрегнированный азотнокислым серебром.	7000 л	Изумруд	Насадка на кран	Два диафрагменных электрохимических реактора, каталитический реактор, и порезная реакционная камера	200000 л
<b>Водолей</b>	<i>Насадка на кран</i>	<i>Церамит Активированный уголь, пропитанный азотнокислым серебром.</i>	<i>5000л</i>				

## Динамика параметра жесткости в воде после фильтров по отношению к его содержанию в водопроводной воде



**Диапазоны концентраций неблагоприятных  
показателей состава воды, пропущенной через  
индивидуальные бытовые фильтры, мкг/л**

Параметр	Барьер	Водолей	Родник	ПДК, мкг/л
Ag	7,8 - <b>120</b>	2,1 - 18	3,5 - 37	50
Ba	30 - <b>90</b>	20 - <b>70</b>	50 - <b>280</b>	100
Fe	20 - 190	20 - 180	20 - 180	300
Mn	11 - 46	19 - <b>220</b>	42 - <b>370</b>	100

## Коэффициенты экологической опасности водопроводной воды и фильтратов. Эксперимент 2002 г.

0-я точка	Класс опасности	Водопр. вода	Водолей	Родник	Барьер
	I - II кл. опасности	0,60	0,96	3,02	2,91
III кл. опасности	0,50	2,21	4,03	0,29	
1-я точка	I - II кл. опасности	0,68	1,01	2,15	1,71
	III кл. опасности	0,39	0,38	1,49	0,81
2-я точка	I - II кл. опасности	0,86	1,61	0,99	1,99
	III кл. опасности	0,75	0,47	0,55	0,18
3-я точка	I - II кл. опасности	0,68	0,42	1,36	1,13
	III кл. опасности	0,51	0,32	2,63	0,93
4-я точка	I - II кл. опасности	0,64	0,62	0,71	0,98
	III кл. опасности	3,68	2,64	0,43	0,25

Примечание: с санитарно-гигиенической точки зрения вещества по степени токсичности делятся на 3 класса: **I класс** (чрезвычайно опасные), **II класс** (высоко опасные) – Cd, Ag, Ba, Pb, **III класс** (опасные) – Fe, Mn, Zn

$$\text{Кэк.оп.} = \Sigma(\text{C}_i/\text{ПДК}_i),$$

где: C<sub>i</sub> – концентрация i-того микроэлемента в воде, ПДК<sub>i</sub> – ПДК i-того компонента

Схема 1. Основные равновесия, в которых участвуют Ca, Mg, Ag, Fe, Al, Mn.

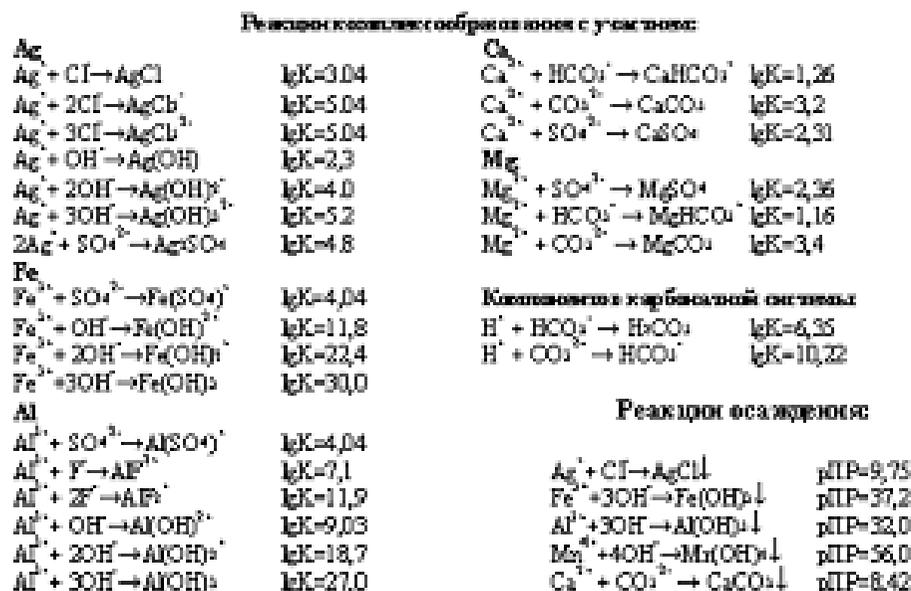


Схема 2. Расчет равновесного состава для водопроводной воды (02.04.02)

Все концентрации представлены в единицах моль/л.

Исходные данные: pH=7,30, I=0,00814. Число балансовых форм = 3, число осуществляемых форм в растворе = 10, равновесные концентрации, рассчитываемые по заданным IP и pH:  
 $[CaCO_3]=6,213E-06$ ,  $[CaHCO_3^+]=3,933E-05$

N хим. форма	матричный стехиометр. коэфф	$\lg f_{\text{ион}}$	$C_{\text{ион}}$
1 CO3 2-	1.0 0.0 0.0	0.000E+00	3.360E-03
2 Mg 2+	0.0 1.0 0.0	0.000E+00	5.500E-04
3 SO4 2-	0.0 0.0 1.0	0.000E+00	8.300E-05
4 HCO3-	1.0 0.0 0.0	2.754E+00	0.000E+00
5 H2CO3	1.0 0.0 0.0	1.702E+00	0.000E+00
6 MgHCO3	1.0 1.0 0.0	3.749E+00	0.000E+00
7 MgCO3	1.0 1.0 0.0	3.009E+00	0.000E+00
8 MgSO4	0.0 1.0 1.0	2.029E+00	0.000E+00
9 CaSO4	-1.0 0.0 1.0	-8.097E+00	0.000E+00
10 Ca 2+	-1.0 0.0 0.0	-8.090E+00	0.000E+00

Результаты расчета равновесного состава раствора

N хим. форма	матр. стех. коэфф.	$\lg f_{\text{ион}}$	$C_{\text{ион}}$
1 CO3 2-	1.0 0.0 0.0	-2.754E+00	7.237E-06
2 Mg 2+	0.0 1.0 0.0	0.000E+00	5.205E-04
3 SO4 2-	0.0 0.0 1.0	0.000E+00	7.117E-05
4 HCO3-	1.0 0.0 0.0	0.000E+00	4.111E-03
5 H2CO3	1.0 0.0 0.0	-1.053E+00	3.641E-04
6 MgHCO3	1.0 1.0 0.0	0.945E+01	2.113E-05
7 MgCO3	1.0 1.0 0.0	3.146E+01	4.414E-06
8 MgSO4	0.0 1.0 1.0	2.029E+00	3.660E-06
9 CaSO4	-1.0 0.0 1.0	-3.342E+00	7.874E-06
10 Ca 2+	-1.0 0.0 0.0	-5.326E+00	1.150E-03

$$(CaCO_3)_{\text{calc.}} = 6,265E-04$$

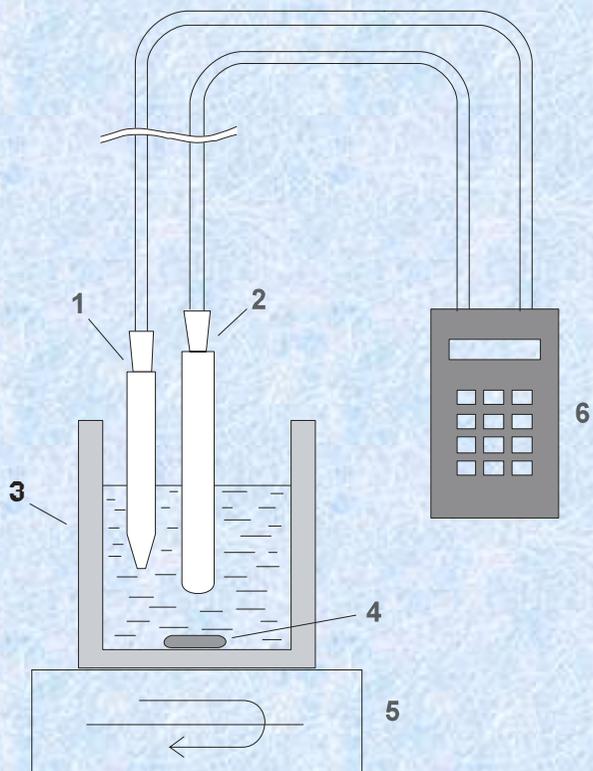
## Бутилированная вода. Основные показатели

	L мСм/л	Карбонат. щелочность мг/л	Фториды, мг/л	Хлориды мг/л	Нитраты мг/л	Сульфаты, мг/л	Натрий мг/л	Кальций мг/л	Кальций мг/л	Магний мг/л	Железо, мг/л	Иодиды, мг/л
Карачинская	2,2±0,3*	940±190	-	460±70	-	-	650±100	3,9±0,08	5,0±0,1	1,22±0,02	<20	-
		800-1200		300-800		150-300	300-800	<50	<50			
Жемчужина Сибири	2,0±0,3	870±179	-	325±50	-	-	630±90	4,0±0,08	3,0±0,1	<1,0	<20	-
		850-1300		250-400		100-250	550-900	<25	<25			
Благовест	..**	-	-	1360±60	-	-	-	-	-	-	-	1,05±0,08
		700-900	0,7-1,1	1000-1800		<10	1000-1400	<50	<10			0,4-0,7
Чистая вода	0,08±0,01	14±3	-	22,5±3	-	-	3,4±0,5	12,6±0,25	5,6±0,1	<1,0	<20	-
		10-30		<30	<10		5-10	5-15	1-5	0,3-2		
Чистая вода фториро- ванная	0,09±0,01	92±2	-	27±4	-	-	4,4±0,7	15,6±0,3	5,05±0,1	<1,0	<20	-
		10-30	1,0-1,5	<30	<10		5-10	5-15	1-5	0,3-2		
Росинка	0,39±0,03	200±40	0,40±0,06	7±1	6,0±0,6	9±1	110±20	-	<1,0	<1,0	50±17	-
		<0,001	0,41	5,6	0,0	0,0	100		40,0	5,0		
Водопро- водная вода	0,40±0,03	2,9±0,5	0,47±0,07	7±1	4,0±0,4	8±1	7,5±0,1	0,99±0,02	50,7±1,0	31,1±0,6	55±19	-

Примечание: \* - в числителе представлены экспериментальные данные, в знаменателе – заявленные по паспорту концентрации; \*\* - прочерк означает, что данный параметр не измерялся

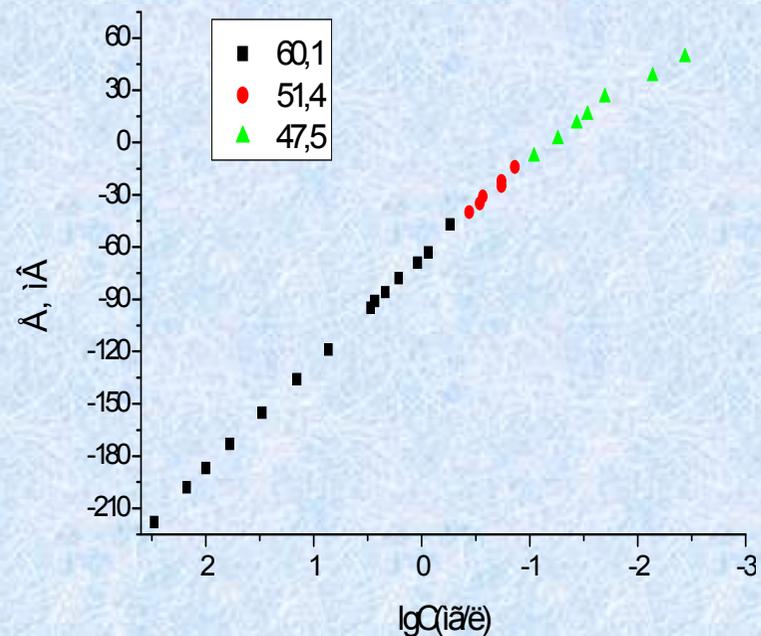
Гельфонд Н.Е., Асташов В.В., Коковкин В.В. и др. Исследование минерального состава питьевых лечебно-минеральных и столовых вод с целью их использования в профилактической медицине// Бюллетень СО РАМН. 2001. №4. С.132-136.

## Определение иодид- (а) и иодат-ионов (б)



### Ячейка

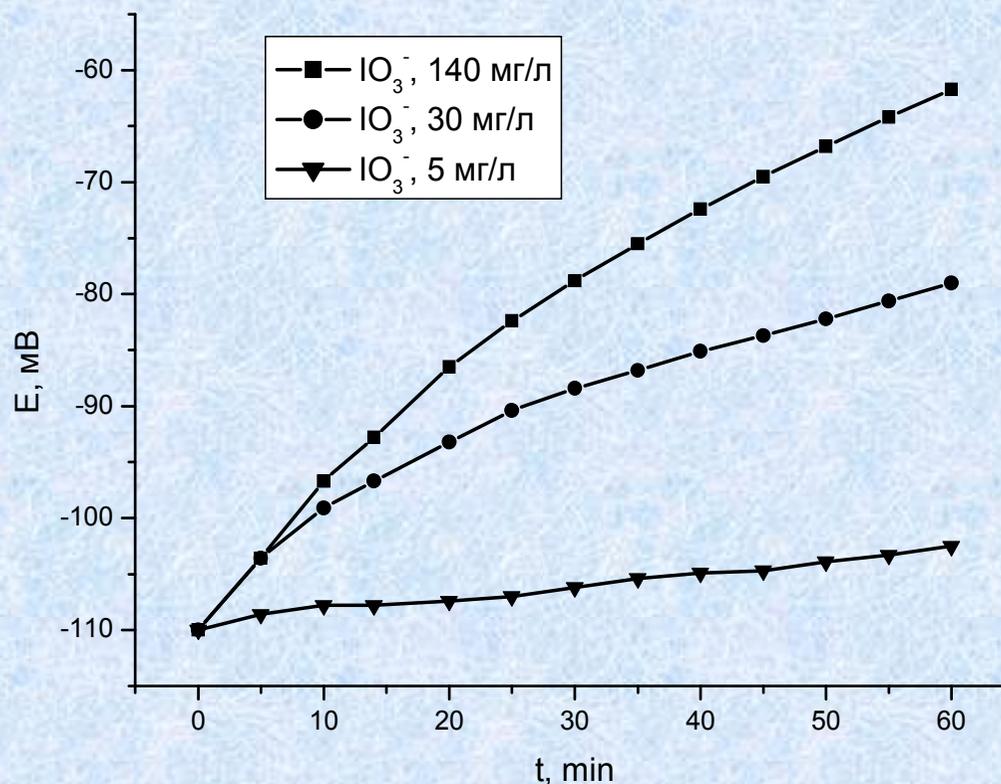
1 – электрод сравнения с солевым мостиком, заполненным 0,1 М  $\text{KNO}_3 + 10^{-4}$  М  $\text{KCl}$ ; Электрод Radelkis OP – I; 3 – пластмассовый стакан; 4 – якорь; 5 – магнитная мешалка; 6 – рН-метр ионометр Анион 210.



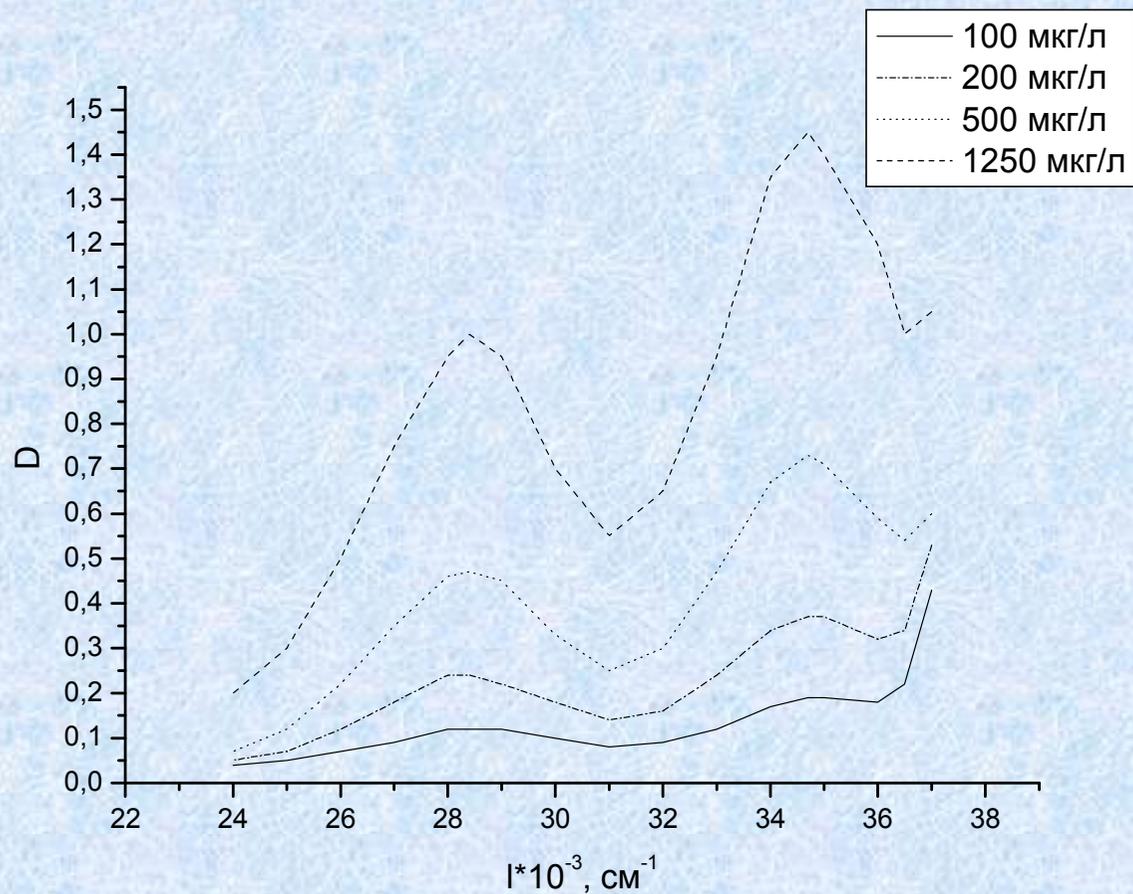
### Электродная функция иодид-селективного электрода

Объект анализа	Прямая потенциометрии	Метод до базиса	Заявленные по паспорту концентрации
Хлориды ( $n=6, \alpha=0.95$ )	$1,05 \pm 0,08$	$1,15 \pm 0,16$	0,4 – 0,7

## Кинетическая потенциометрическая методика определения иодат-ионов (б)

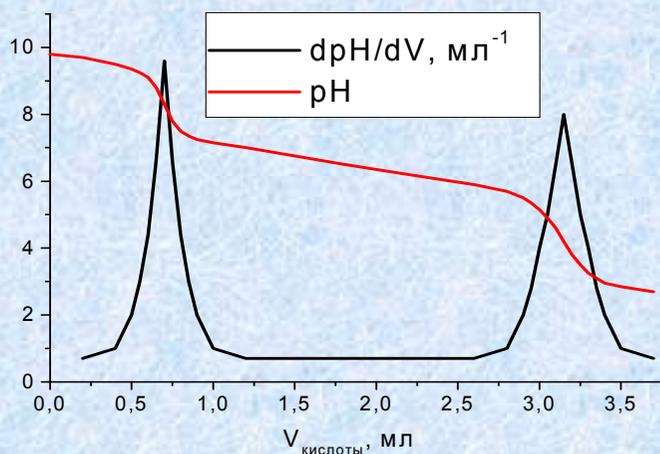


Изменение потенциала гальванической ячейки с йодид-селективным электродом и раствором с концентрацией йодид-ионов 650 мкг/л и различными концентрациями йодат-ионов при  $\text{pH}=2$ .

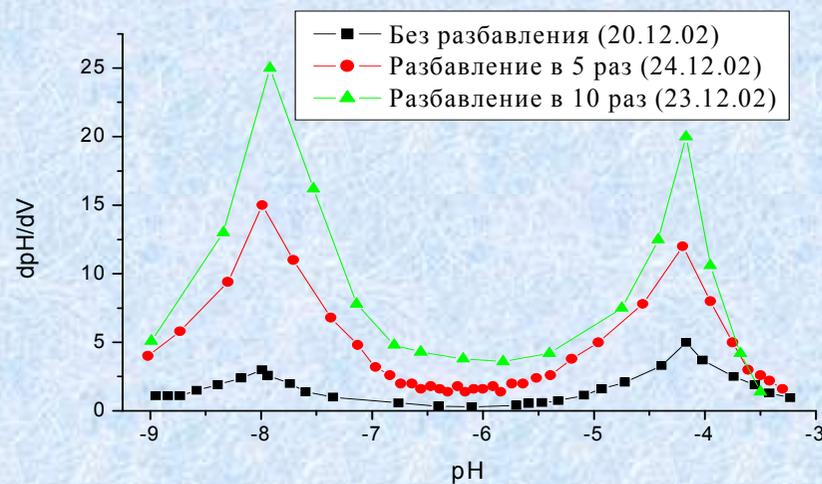


Спектр поглощения трийодид-иона при различных концентрациях иодат-ионов

## Методика определения общего неорганического углерода



Дифференциальная ( $dpH/dV$ ) и интегральная ( $pH$ ) кривые титрования



Зависимость высоты пика от разбавления пробы водопроводной воды верхней зоны Академгородка

## Источники Восточной Сибири

Отбор проб проводили по следующей схеме:

- для определения обобщенных характеристик (не консервировался)
- фильтровался через мембранный фильтр  $\varnothing$  0,45 мкм, осадок высушивался на воздухе, а фильтрат консервировался азотной кислотой. Фильтрат и осадок использовали для определения неорганических веществ
- для оценки неоднородности (идентичности) параллельных проб при определении неорганических веществ отбирали образец, который консервировался азотной кислотой

## Методы анализа и определяемые компоненты

Определяемые компоненты	Метод анализа
pH, HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	Потенциометрия ( Анион -410, Новосибирск)
SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> , Cl <sup>-</sup> , NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	Капиллярный электрофорез, Капель, С.-Пб.
Ca, Mg, Na, K, Zn, Sr	Атомно-абсорбционная пламенная спектрометрия (Hitachi 8000, Япония )
Ba, Fe, Cd, Mn, Cu, Pb, Cr , Ni, Be, Sn, B, Co, As, Sb, V	Атомно-эмиссионная спектроскопия с дуговым возбуждением спектров ( PGS-2, Германия )
NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	Фотоколориметрия (SQ-118, Merck, Германия)

## Классификация определяемых элементов и параметров по СанПиН

Нормируемые	Ненормируемые
Алюминий, барий, бериллий, бор, железо, кадмий, марганец, медь, мышьяк, никель, нитраты, селен, свинец, стронций, серебро, сульфаты, хлориды, хром, цинк, сурьма, ванадий, кобальт, натрий, ртуть, фосфаты; рН, минерализация, жесткость	Кальций, магний, калий, карбонаты, олово
<b>ИТОГО: 28</b>	<b>ИТОГО: 5</b>

## Пример химико-термодинамического моделирования

Исходные данные pH=8.10, I=0.015, Проба У5

Число базисных форм = 3, число сосуществующих форм в растворе = 10

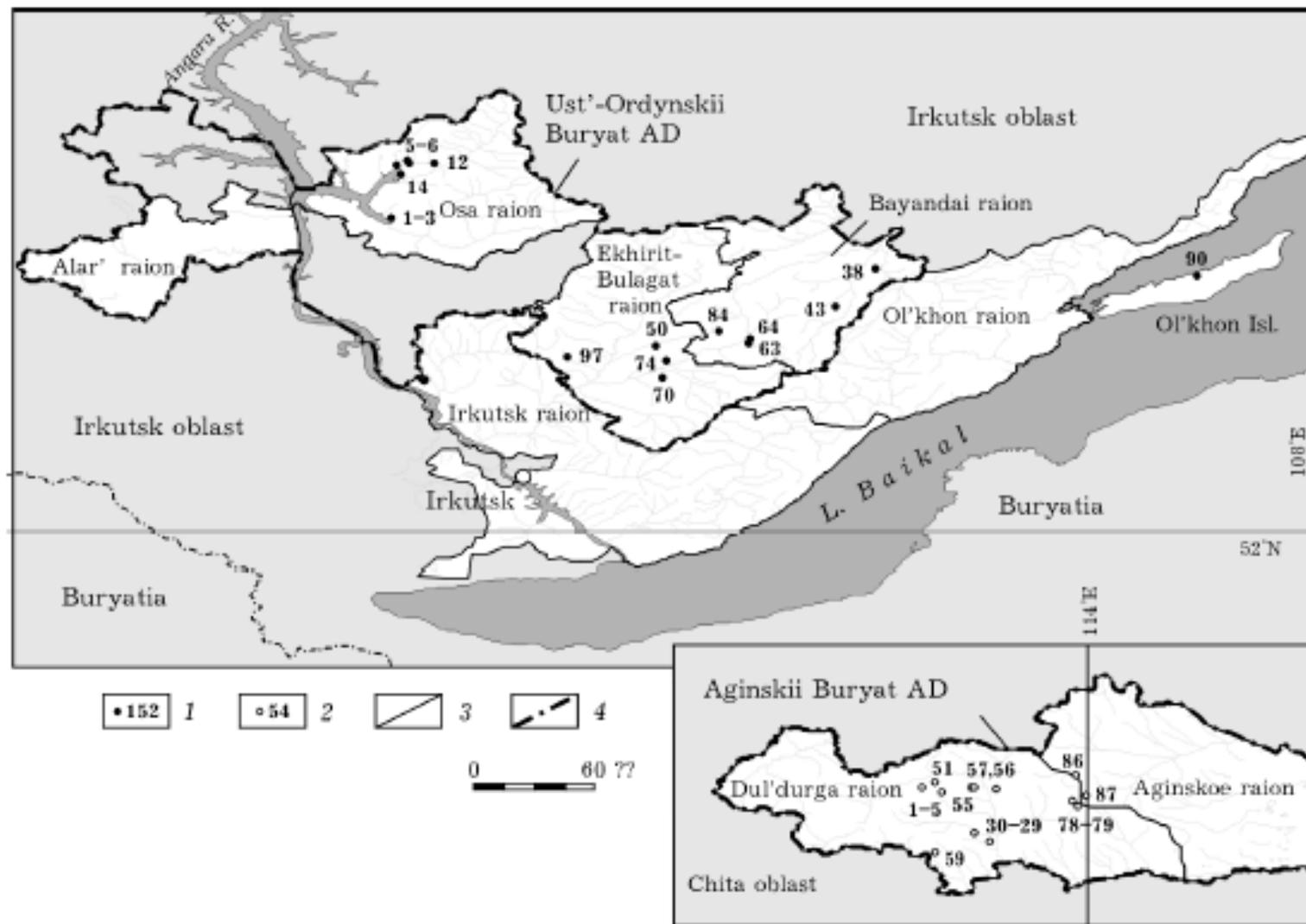
[CaCO<sub>3</sub>]=5.428E-06 [CaHCO<sub>3</sub>]=8.215E-06

1	CO <sub>3</sub> 2-	1.0	0.0	0.0	0.000E+00	1.435E-03
2	Mg 2+	0.0	1.0	0.0	0.000E+00	1.800E-03
3	SO <sub>4</sub> 2-	0.0	0.0	1.0	0.000E+00	2.940E-03
4	HCO <sub>3</sub> -	1.0	0.0	0.0	1.904E+00	0.000E+00
5	H <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	1.0	0.0	0.0	2.530E-02	0.000E+00
6	MgHCO <sub>3</sub>	1.0	1.0	0.0	2.847E+00	0.000E+00
7	MgCO <sub>3</sub>	1.0	1.0	0.0	2.967E+00	0.000E+00
8	MgSO <sub>4</sub>	0.0	1.0	1.0	1.927E+00	0.000E+00
9	CaSO <sub>4</sub>	-1.0	0.0	1.0	-6.155E+00	0.000E+00
10	Ca 2+	-1.0	0.0	0.0	-8.032E+00	0.000E+00

Результаты расчета равновесного состава раствора

1	CO <sub>3</sub> 2-	1.0	0.0	0.0	-1.904E+00	2.276E-05
2	Mg 2+	0.0	1.0	0.0	0.000E+00	1.437E-03
3	SO <sub>4</sub> 2-	0.0	0.0	1.0	0.000E+00	2.552E-03
4	HCO <sub>3</sub> -	1.0	0.0	0.0	0.000E+00	1.822E-03
5	H <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	1.0	0.0	0.0	-1.878E+00	2.412E-05
6	MgHCO <sub>3</sub>	1.0	1.0	0.0	9.435E-01	2.299E-05
7	MgCO <sub>3</sub>	1.0	1.0	0.0	1.064E+00	3.030E-05
8	MgSO <sub>4</sub>	0.0	1.0	1.0	1.927E+00	3.099E-04
9	CaSO <sub>4</sub>	-1.0	0.0	1.0	-4.252E+00	7.846E-05
10	Ca 2+	-1.0	0.0	0.0	-6.128E+00	4.086E-04

(CaCO<sub>3</sub>) cal. = 4.043E-04



Scheme showing the location of sampling sites on the administrative maps of regions: 1 — numbers of sampling sites on the map of Ust'-Ordynskii BAD, 2 — numbers of sampling sites on the map of Aginskii BAD, 3 — borders of raions, 4 — borders of autonomous districts.

V.V. Kokovkin, F.V. Sukhorukov, O.V. Shuvaeva, V.I. Belevantsev, V.I. Malkova, V.D. Strakhovenko, B.L. Shcherbov, *Contemporary Problems of Ecology*, 2008, Vol. 1, No. 4,1  
<http://dx.doi.org/10.1134/S1995425508040139>

Unfavorable parameters of chemical composition of drinking water in Ust'-Ordynskii BAD and Irkutsk oblast, in MPC units

Class of danger	Parameter	U-1	U-2	U-3	U-5	U-6	U-12	U-14	U-38	U-43	U-50	U-63	U-64	U-70	U-74	U-84	U-90	U-97
1st and 2nd	$K_{\text{св.д}}$ (1-2 class)	1.37 (Sr)	1.8 (Ba)	1.1	1.0	1.5	32 (Al)	1.8 (Ba)	0.38	0.86	0.89	2.0	0.89	1.23 (Ba)	1.65 (Ba)	1.0 (Ba)	0.71	0.49
3rd	Manganese	0.04	0.04	0.02	0	0.72	4.1	0.25	0.15	0	0	0.13	4.2	3.9	4.9	6.7	0.02	2.1
	Iron	0.05	0.42	0.15	0	0.28	2.23	0.12	0.12	0.13	0.05	0	0.37	0.47	2.7	0.6	0.04	0.57
	Nitrates	0	0.23	1.3	0.14	2.1	0	0.01	1.2	0.8	3.5	10.8	0	0.03	0.03	0.22	0.28	0.8
4th	Sulfates	1.6	0.34	0.36	0.14	0	1.34	0.07	0	0.42	0.38	0	0.80	0.03	0.04	0.1	0.07	0.2
	Chlorides	0.12	0	0.76	0.03	0.02	0.12	0.02	0	0.03	0.14	0	0.18	0.04	0.01	0.15	0.03	0.11
General	Hardness (Ca + Mg)	2.1	0.57	1.34	0.6	0.7	1.7	0.44	0.27	0.9	1.4	1.0	1.1	1.0	0.46	0.9	0.37	0.63
	pH	8.9	8.5	8.9	8.5	8.4	8.5	8.7	8.9	8.9	8.5	8.4	8.7	8.8	8.9	8.3	8.5	8.7
	Mineralization	1.22	0.37	0.79	0.3	0.34	1.05	0.23	0.16	0.43	0.75	0.67	0.76	0.54	0.29	0.5	0.23	0.41
Total number of unfavorable parameters		5	1	4	1	2	6	1	2	1	2	3	2	4	4	2	0	1

Unfavorable parameters of chemical composition of drinking water in Aginskii BAD in MPC units

Class of danger	Parameter	A-1	A-2	A-3	A-4	A-5	A-29	A-30	A-51	A-55	A-56	A-57	A-58	A-59	A-78	A-79	A-86	A-87
1st and 2nd	$K_{\text{св.д}}$ (1-2 class)	0.73	0.62	0.67	0.75	0.82	0.87	1.0	0.75	0.57	0.61	81 Hg	0.79	3.7 Na	1.0	1.3	0.9	0.93
3rd	Manganese	0.31	0.01	0.03	0.11	0.06	0.8	0.07	0.04	0.01	0.01	1.8	0.07	0.01	0.04	0.02	0.4	0.07
	Iron	0.67	0.1	0.17	0.3	0.21	1.9	0.38	0.29	0.06	0.04	14.6	0.16	0.01	0.32	0.08	0.24	0.15
	Nitrates	0.01	0.1	0.09	0.09	0.03	0.14	1.6	0.09	0.06	0.04	0.02	0.5	0.27	0.04	1.02	0.05	1.23
4th	Sulfates	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.1	0.05	0.02	0	0	0.01	0.03	0.3	0.1	0.09	0.05	0.03
	Chlorides	0	0	0	0	0	0	0.22	0	0	0	0	0.01	0.94	0.00	0.06	0.01	0.03
														3				
General	Hardness (Ca + Mg)	0.12	0.09	0.1	0.1	0.08	0.46	0.62	0.12	0.07	0.1	0.68	0.16	1.16	0.58	0.7	0.36	0.57
	pH	8.1	6.8	6.5	6.9	7.5	8.0	7.6	6.8	7.9	7.3	7.2	7.4	9.5	8.0	7.8	8.3	7.8
	Mineralization	0.1	0.1	0.08	0.09	0.12	0.28	0.42	0.1	0.06	0.07	0.4	0.3	3.75	0.45	0.48	0.28	0.4
Total number of unfavorable parameters		0	0	0	0	0	1	2	0	0	0	3	0	5	1	2	0	1

# Выводы

- 1. Предложены и опробованы схемы и методы химического анализа основных групп экотоксикатов в снежном покрове, воздухе и почвенном покрове.**
- 2. Предложены и опробованы на полученных экспериментальных данных модели пространственного распределения основных групп экотоксикатов. Для источников различной пространственно-временной структуры разработаны схемы оптимального пробоотбора снежного и почвенного покровов.**
- 3. С использованием методов химико-термодинамического моделирования оценено распределение компонентов химического состава между раствором и твердой фазами при снеготаянии. Показана возможность образования вторичных осадков.**

- 4. Исходя из гидрохимической классификации по минерализации, вода питьевых поверхностных и подземных источников Усть-Ордынского БАО и Агинского БАО за незначительным исключением отдельных мест относится к пресной. Исходя из классификации по доминирующим ионам О.А. Алекина, вода питьевых источников Усть-Ордынского БАО может быть отнесена к 5, а Агинского БАО — к 2 разным видам. Распределение микроэлементов в пробах вод обоих регионов по уровням концентраций примерно совпадает.**
- 5. Воды почти 90% в Усть-Ордынском БАО и 67% в Агинском БАО источников, используемых для питьевых целей являются неблагоприятными для использования.**

**Среди главных неблагоприятных факторов -  $K_{эк.оп.}$ , содержание железа, нитратов, жесткость (Ca+Mg), содержание натрия и марганца; высокие минерализация и величина рН.**

**6. Методы химико-термодинамического моделирования позволяют оценивать содержание форм макро- и микроэлементов из выбранного списка. Для отдельных элементов выявлены особенности физико-химического поведения в растворах.**