

Scientific and technical journal «Technogenic and Ecological Safety»

RESEARCH ARTICLE
OPEN ACCESS

АНАЛИЗ ЭКОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ОСНОВНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ КОМПОНЕНТОВ ПЕНООБРАЗОВАТЕЛЕЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ПОЖАРОТУШЕНИИ

М. А. Гурбанова¹, В. М. Лобойченко², Р. И. Шевченко², И. Ф. Дадашов¹¹Академия МЧС Азербайджанской Республики, Баку, Республика Азербайджан²Национальный университет гражданской защиты Украины

УДК 614.84+504.75

DOI: 10.5281/zenodo.3780065

Получено: 12 March 2020

Принято: 22 April 2020

Cite as: Gurbanova M., Loboichenko V., Shevchenko R., Dadashov I. (2020). Analysis of environmental characteristics of the basic organic components of the foaming agents used in fire fighting. Technogenic and ecological safety, 7(1/2020), 27–37. doi: 10.5281/zenodo.3780065

Анотация

Проанализировано влияние пенообразователей для пожаротушения, содержащих фтор и безфторных, на окружающую среду и человека. Показано негативное воздействие продуктов распада фторсодержащих пенообразователей на организм пожарных, растительных и животных организмов. Отмечается недостаточность данных о воздействии на окружающую среду не содержащих фтор пен, используемых в пожаротушении. Теоретически обосновано использование для анализа экологических параметров пенообразователей для пожаротушения одного из расчетных методов Quantitative Structure Property Relationships (QSAR), базирующихся на построении количественных соотношений «структура вещества – свойство вещества». Определен ряд экологических характеристик основных органических компонентов пенообразователей для пожаротушения в приложении GUSAR на основе их 2D структурных формул. Как основные компоненты пенообразователей исследованы отдельные представители первичных и вторичных алкилсульфатов натрия, алкилсульфонатов натрия, алкиларилсульфонатов натрия и нафтеновых кислот. Для этих соединений получены значения LC₅₀ (fathead minnow (*Pimephales promelas*)), LC₅₀ (*Daphnia magna*), IGC₅₀ (*Tetrahymena pyriformis*) и коэффициент биоконцентрации BCF. Также определена острая токсичность для крыс (LD₅₀) при разных путях попадания соединения в организм животного. Показано, что большинство исследуемых компонентов пенообразователей и продуктов их разложения (кроме перфтороктансульфоновой кислоты и этаноламина) относятся ко 2 классу острой токсичности.

Получено, что пенообразователи на основе нафтеновых кислот и продукты их разложения более безопасны для человека, чем пенообразователи на основе исследованных ПАВ и фторсодержащих соединений. Показано, что продукты разложения пенообразователей на основе нафтеновых кислот не хуже, а иногда и более безопасны для окружающей среды и человека, чем сами исходные вещества и другие пенообразователи.

Ключевые слова: пенообразователь, расчетные методы, экологическая характеристика, пожаротушение, структурная формула.

Постановка проблемы

Чрезвычайные ситуации природного и техногенного характера, в том числе и пожары, являются на сегодня неотъемлемой составляющей жизнедеятельности человека. Негативное воздействие, которое при этом оказывают непосредственно пожары, осложняется также и присутствием самих пожаротушающих агентов, в частности, таких систем как пены, аэрозоли, порошки, гелеобразующие системы и пр. [1, 2].

Так, еще в 1994 г. Международная ассоциация по науке о пожарной безопасности (The International association for Fire Safety Science) отмечала негативное воздействие на окружающую среду как непосредственно самого пожара, так и пожаротушающих агентов [3]. Используемые вода, газы, порошки и пены попадают в почву, воду, атмосферу и вместе с продуктами горения отрицательно влияют на растительные и животные организмы, человека и окружающую среду в целом [4], что в дальнейшем также может привести к возникновению чрезвычайных ситуаций, связанных с гибелью живых существ.

Одним из наиболее эффективных и используемых средств в современном пожаротушении являются пены. Они применяются для тушения пожаров различных классов и

представляют собой водный раствор пенообразователя с различными добавками органической и неорганической природы. В пенообразователях органические соединения для пожаротушения являются основным компонентом и могут также присутствовать в виде вспомогательных соединений, придающих необходимые специфические характеристики.

Пожаротушающие характеристики пенообразователей, а в последнее время и экологические, являются предметом пристального внимания исследователей, производителей и конечных пользователей. Так, Стокгольмская конвенция ООН о стойких органических загрязнителях отнесла к данным соединениям продукты распада фторсодержащих пленкообразующих пенообразователей – перфтороктановую кислоту (ПФОК), ее соли и перфтороктансульфоновую кислоту (синонимы – перфтороктановый сульфонат, перфтороктановая сульфоновая кислота) (ПФОС) [5]. После этого часть стран ограничила или взяла курс на отказ от их использования. Избыток поверхностно-активных веществ (ПАВ), которые попадают в окружающую среду при использовании безфторных пенообразователей для пожаротушения, также вызывает сомнения в их безопасности [6, 7]. В свою очередь, это

стимулировало поиск и развитие новых групп огнетушащих веществ, таких, как гелеобразующие системы с носителем и без [8, 9], быстротвердеющие пены [10], фторсодержащие пенообразователи с длиной углеродной цепочки C6 [11] и др. Еще одним направлением стало более детальное исследование экотоксикологических свойств уже разработанных составов. Полученная информация позволяет потребителю сделать более осознанный выбор пожаротушащего пенообразователя, наиболее эффективного как с точки зрения пожаротушащих характеристик, так и максимально безопасного для окружающей среды и самого человека.

Вышеуказанное демонстрирует, что вопрос поиска пенообразователей, которые помимо удовлетворительных пожаротушащих свойств, являются безопасными для окружающей среды и человека, является на сегодня актуальной проблемой.

Анализ последних исследований и публикаций

Исследованию экологических и токсикологических свойств пенообразователей для пожаротушения, содержащих и не содержащих фтор, посвящено большое количество работ [4, 12].

Так, авторы [13] при сравнительном исследовании пенообразователей различных производителей, в частности, Sthamex F-15, Finiflam F-15, Ехругоl F-15, Moussol-APS F-15 and Pyrocool B, отмечают их значительное экотоксическое воздействие на наземные растительные и животные организмы. При этом как наименее экотоксичный проявил себя Moussol-APS F-15. В то же время авторы указывают на необходимость экотоксикологических испытаний пенообразователей, использующихся в целях пожаротушения, и недостаточный уровень чешского законодательства в данном вопросе.

Выполненное в работе [14] исследование влияния синтетических моющих средств и средств на основе мыла на живые организмы показало меньшее токсическое воздействие последних. О преимуществах использования пенообразователей на основе олеатов и стеаратов говорится также авторами [15]. При этом отмечается экологичность этих пенообразователей.

Вредное влияние перфторированных поверхностно-активных веществ, используемых в пожаротушении, и продуктов их распада на окружающую среду показано в работах [16, 17]. Отмечается их отрицательное воздействие на различные наземные организмы [18] и необходимость корректного проведения исследования для получения достоверных данных о биодеградации этих соединений.

Проведенные исследования воздействия фторсодержащих пенообразователей на организм финских [19], австралийских [20] и шведских [21] пожарных в процессе их профессиональной деятельности подтвердили накопление фторсодержащих продуктов распада этих пенообразователей в

биологических жидкостях человека. Рекомендуются в дальнейшем использовать безфторных пенообразователей [19].

В то же время, несмотря на уход от производства и использования фторсодержащих пенообразователей и акцентирование на применение биодegradируемых агентов [22, 23], остается открытым ряд вопросов. В частности, недостаточно изучен вопрос экотоксического воздействия безфторных пен на окружающую среду и человека. Коммерческая закрытость информации о составе пенообразователя не позволяет однозначно говорить о его безфторности и некоторых других моментах [23].

Таким образом, нерешенной на сегодня частью проблемы является вопрос определения экологических характеристик пенообразователей, используемых в пожаротушении.

Постановка задания и его решение

Целью данной работы является анализ экологических характеристик органических компонентов ряда пенообразователей, применяемых в пожаротушении.

Для достижения поставленной цели необходимо:

- теоретически обосновать выбор метода для анализа экологических характеристик основных органических компонентов пенообразователей;
- проанализировать экологические параметры основных органических компонентов ряда пенообразователей с использованием выбранного метода.

Воздействие химических веществ, в том числе и поступающих с огнетушащими средствами, на окружающую среду можно оценивать как экспериментально, так и расчетными способами [24].

Сложности при исследовании свойств органических веществ, в том числе и их воздействия на окружающую среду, обусловлены рядом факторов. Среди них, в первую очередь, следует выделить следующие: большое и постоянно растущее количество синтетических соединений; потребность в достаточном финансировании и времени для проведения исследований; сложность строения органических молекул (полимеры; молекулы, содержащие циклические или разветвленные структуры, многоэлементность состава, наличие изомеров).

С учетом этого более привлекательным становится использование подходов, связанных с получением расчетных характеристик. Выбор последних в работе производился, исходя из следующих соображений. Согласно СГС [25] преимущество отдавалось экспериментальным данным, но если они отсутствовали, то воздействие химических соединений на окружающую среду оценивалось с использованием методов количественных зависимостей «структура-активность» – Quantitative Structure Activity Relationships (QSARs). Это позволило оценить потенциал биоаккумуляции, представленный через коэффициент распределения октанол/вода $\log K_{ow}$,

а также коэффициент биоконцентрации (Bioconcentration factor – BCF) или коэффициент биоаккумуляции (bioaccumulation factor – BAF) [26, 27].

На сегодняшний день существуют разные подходы к определению коэффициентов биоаккумуляции и биоконцентрации. Так, применяются эмпирические модели, модели массового баланса [27]. Однако наибольшее распространение получили методы с применением зависимостей «структура-активность» SAR (Structure Activity Relationships). SAR – это подход, предназначенный для нахождения взаимосвязей между химической структурой и характеристикой (свойствами), изучаемых химических соединений. При этом выделяют качественные и количественные SAR, которые вместе обозначаются как QSAR [28]. Использование методов QSAR рекомендовано различными международными документами (СГС, REACH) [25, 28] и организациями, среди которых ЕХА, Организация экономического сотрудничества и развития (ОЭСР) и ряд других [24, 29].

Появление огромного количества органических соединений стимулировало развитие методов QSAR и QSPR (Quantitative Structure Property Relationships – количественные соотношения «структура-свойство»). Использование этих методов сделало привлекательным возможность прогнозировать разнообразные свойства химических веществ, используемых в различных сферах, в том числе и в пожаротушении [30]. Кроме того, они позволяют оценивать уже существующее воздействие при относительно небольших затратах.

Известны различные методы QSAR/QSPR, которые учитывают размерности описания структуры молекул или способ представления дескрипторов [31, 32]. Химические дескрипторы лежат в основе моделирования QSAR/QSPR, поэтому существует много различных типов данных дескрипторов, отражающих различные уровни представления химической структуры. Эти уровни варьируются.

Количественное моделирование структуры и отношений обычно включает в себя этапы сбора или разработки набора химических веществ, выбора дескрипторов, которые корректно соотносят химическую структуру с активностью вещества, и применение статистических методов, которые устанавливают корреляционные зависимости изменения в структуре с изменениями в активности исследуемого соединения [33]. При этом используемые статистические методы могут быть линейными и нелинейными [32, 33]. Более распространены линейные подходы, к которым относятся множественная (или многомерная) линейная регрессия, регрессия частичных наименьших квадратов, регрессия на главных компонентах, гребневая регрессия. Для нелинейного моделирования используют полиномиальную нейронную сеть, искусственные нейронные сети, метод ближайших соседей и т.п. Также используются ядерные методы машинного обучения. Известно несколько тысяч дескрипторов,

которые рассчитываются с использованием различных пакетов программ, таких как DRAGON, CODESSA и др. [32]. Получение статистически устойчивой модели очень сильно зависит от того, насколько хорошо выбранные дескрипторы кодируют изменение активности вещества со структурой. Чем больше информации имеет специалист о биологическом механизме действия химических веществ на молекулярном уровне, тем лучше он может выбирать среди широкого спектра и типов конкретных молекулярных дескрипторов [33].

Наиболее используемыми на сегодня являются методы 2D QSAR и 3D QSAR. В рамках 2D QSAR двумерное представление позволяет определить молекулярные 2D дескрипторы. Основными преимуществами этих параметров QSAR является то, что они содержат простую и полезную информацию о молекулярной структуре, инвариантны к рототрансляции молекулы и могут быть рассчитаны, избегая оптимизации структуры. В методах 3D QSAR выделяют два основных типа: с использованием дескрипторов на основе решетки и с использованием дескрипторов на основе поверхности [32, 33]. Наиболее используемым среди методов, основанных на решетке, относится сравнительный анализ молекулярного поля (Comparative Molecular Field Analysis – CoMFA), который является наиболее изученным и применяемым методом 3D-QSAR.

Существует большое количество коммерческих программ, предлагающих QSAR/QSPR методы для различных сфер деятельности, как с использованием собственных дескрипторов, так и с применением массивов из разнообразных баз данных, в том числе и с возможностью выбора метода статистических расчетов. Их применение ограничено финансовыми возможностями, техническими характеристиками оборудования, которое используется для расчетов, и уровнем подготовки оператора.

Наряду с этим имеется ряд бесплатных программ, позволяющих провести исследование химических соединений методами 2D QSAR и/или 3D QSAR, как в онлайн режиме, так и с помощью предустановленных приложений. Среди них можно отметить GUSAR, OCHEM, CHEMBENCH, QSAR Toolbox и др.

Приложение GUSAR используется для создания моделей QSAR/QSPR на основе соответствующих обучающих наборов, представленных в виде файла, содержащего данные о химической структуре и конечной точке в количественном выражении [33, 34]. Это приложение включает консенсус-прогнозирование, оценку области применимости, проверку внутренних и внешних моделей, а также интерпретацию полученных результатов. В качестве дескрипторов QNA приложение GUSAR использует значения P и Q, рассчитанные для каждого атома молекулы. Расчет этих значений основан на матрице связности и стандартных значениях потенциала ионизации и сродства к электрону атомов в молекуле. Согласно [33, 34] оценивание свойства исследуемого химического соединения рассчи-

тывается как среднее значение функции значений P и Q атомов молекулы в пространстве дескрипторов QNA. Алгоритм GUSAR применяет три случайно выбранных параметра для генерации различных моделей 2D QSAR на основе дескрипторов QNA. Среднее сходство трех ближайших соседей используется для оценки области применимости AD (applicability domain) модели.

Приложение GUSAR позволяет выполнять количественный прогноз экологических характеристик химических соединений на основе разработанных моделей QSAR таких конечных точек: 96-часовая 50% летальная концентрация (LC₅₀) для fathead minnow (*Pimephales promelas*), 48-часовая 50% летальная концентрация (LC₅₀) для *Daphnia magna*, 50% концентрация ингибирования роста (IGC₅₀- 50% Inhibition Growth Concentration) *Tetrahymena pyriformis* и коэффициент биоконцентрации (Bioaccumulation factor) Log10 (BCF), а также прогнозирование значений LD₅₀ для крыс с четырьмя типами введения (пероральное, внутривенное, внутривентральное, подкожное, ингаляционное) in silico.

Таким образом, оценка экологических характеристик основных органических компонентов пенообразователей на основе результатов, полученных методом 2D QSAR в приложении GUSAR, позволяет учесть взаимосвязь структуры и свойств используемых в пожаротушении основных органических компонентов пенообразователей.

Учитывая отмеченное выше, именно это приложение было выбрано для анализа экологических характеристик основных органических компонентов пенообразователей на основе методов QSAR/QSPR.

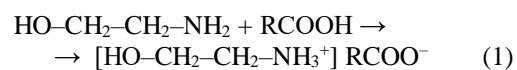
Поскольку во многих случаях точная структурная формула действующего соединения, используемого в пожаротушении, является коммерческой тайной, далее сделано допущение в виде оценки экологических свойств родственных изомерных веществ и (или) продуктов их распада.

В процессе анализа определялись экологические характеристики ряда синтетических пенообразователей, содержащих в качестве основного компонента органические соединения – ПАВ или фторсодержащие соединения. Так, фторсодержащие ПАВ разлагаются с образованием конечных продуктов ПФОС и ПФОК [35, 36]. Поэтому в работе проводится определение экологических характеристик данных соединений с помощью приложения GUSAR. Для этого используются инструменты этой программы и возможности имеющихся баз данных известных химических соединений, в частности, PubChem [37].

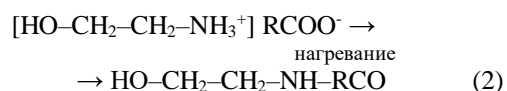
Экологические параметры ПАВ, не содержащих фтор, определялись на примере отдельных представителей первичных и вторичных алкилсульфатов натрия, алкилсульфонатов натрия [38, 39] (где алкил – углеводородный радикал C₈ – C₁₈), алкиларилсульфонатов натрия [39] (на примере додецил бензолсульфоната натрия C₁₂H₂₅C₆H₄SO₃Na). Более детально исследованы экологические характеристики пенообразователей

«НКПИ-34-2» и Нафтаена, разработанных в Азербайджане на базе аминных комплексов нефтяных кислот [18, 41].

Общий вид получения моноаминных комплексов нефтяных кислот имеет вид [41]:



При нагревании (в процессе пожаротушения) возможна дегидратация с образованием соответствующего амида:



В качестве R могут выступать циклоалкильные, алкильные, алкеновые или ароматические радикалы. В работе в качестве примера взяты радикалы C₁₇H₃₃ и C₁₇H₃₅. Исходя из этого, 2D структурные формулы ряда исследуемых соединений, входящих в состав основных компонентов пенообразователей для пожаротушения, представлены на рис.1–11.

Наличие структурных формул (рис. 1–11) позволило рассчитать экологические характеристики отдельных представителей основных действующих веществ пенообразователей для пожаротушения или продуктов их распада. Результаты расчета представлены в таблице 1.

Токсическое воздействие исследуемых соединений определялось путем определения острой токсичности для крыс (табл. 2) в виде LD₅₀ при разных путях попадания соединения в организм животного: IP (Intraperitonealroute) – внутривентральный путь, IV (Intravenousroute) – внутривенный путь; Oral (Oralroute) – оральный путь; SC (Subcutaneousroute) – подкожный путь.

Полученные данные сопоставлены с критерием биоаккумуляции, регламентированным REACH. Согласно этого документа вещества, имеющие BCF выше 3,3, являются биоаккумулятивными [26]. Результат сопоставления представлен на рис. 12.

Анализ полученных результатов (рис. 12) позволяет сделать вывод о том, что биоаккумулятивным веществом, у которого значение рассчитанного BCF превышает критерий биоаккумулятивности, является перфтороктановый сульфат. Остальные соединения имеют значения BCF ниже этого критерия. Причем, как видно из рис. 12, амины, пенообразователи на основе алкильных нафтеновых кислот и продукты их распада обладают меньшими значениями BCF, и, соответственно, меньше аккумулируются в окружающей среде по сравнению с циклическими соединениями.

Согласно СГС [25] токсичность соединения, в частности, для водной среды, может быть определена с помощью его воздействия на один или несколько видов живых организмов (водоросли, рыбы, ракообразные). В качестве критерия в работе использовано значение LC₅₀ (мг/л) для ракообразных вида *Daphnia magna*, рассчитанное с использованием данных табл. 1.

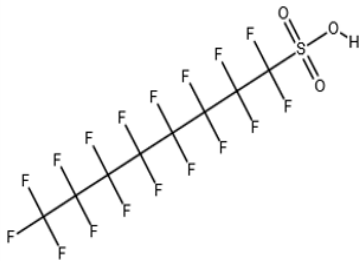


Рисунок 1 – 2D структурная формула ПФОС

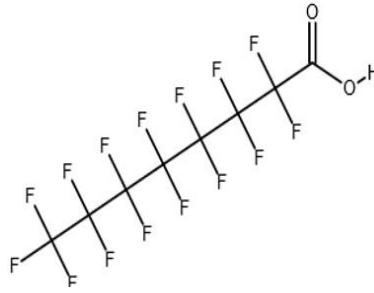


Рисунок 2 – 2D структурная формула ПФОК

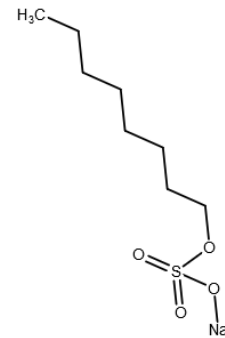


Рисунок 3 – 2D структурная формула октилсульфата натрия

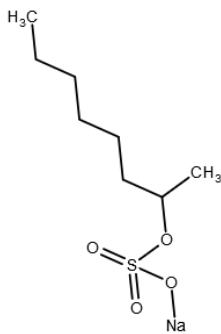


Рисунок 4 – 2D структурная формула изогептилсульфата натрия

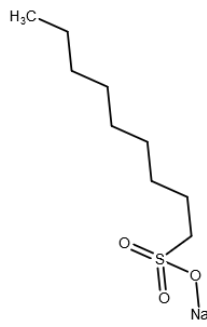


Рисунок 5 – 2D структурная формула нонилсульфоната натрия

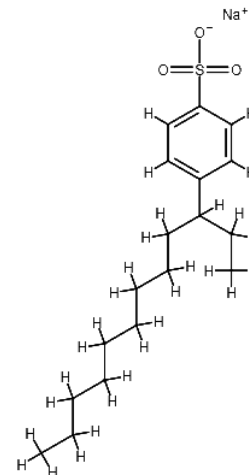


Рисунок 6 – 2D структурная формула додецилбензолсульфоната натрия

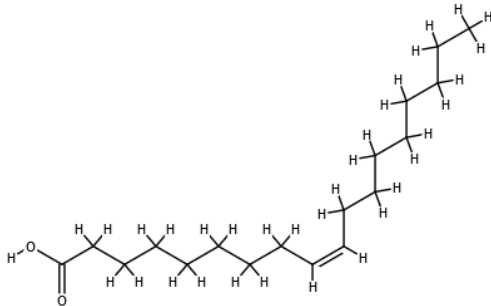


Рисунок 7 – 2D структурная формула $C_{17}H_{33}COOH$ (олеиновая кислота)

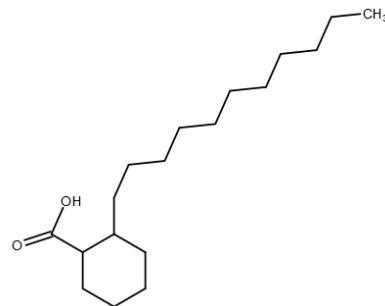


Рисунок 8 – 2D структурная формула $C_{17}H_{33}COOH$ (ундецилциклогексановая кислота)

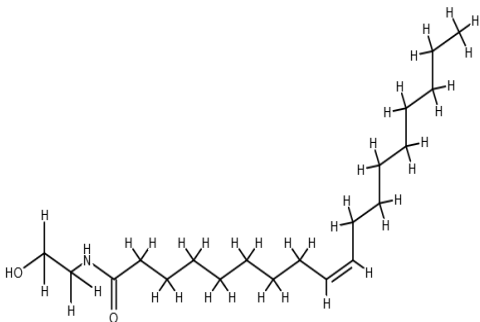


Рисунок 9 – 2D структурная формула $C_{17}H_{33}CONHC_2H_4OH$ (моноамид олеиновой кислоты)

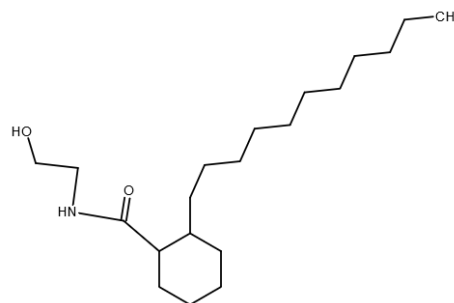


Рисунок 10 – 2D структурная формула $C_{17}H_{33}CONHC_2H_4OH$ (моноамид ундецилциклогексановой кислоты)

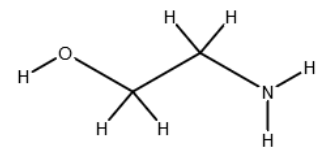


Рисунок 11 – 2D структурная формула этаноламина

Таблица 1 – Экологические характеристики исследуемых соединений

№ п/п	Вещество	Молекулярная масса	Активность	Прогнозируемое значение
1	C ₈ HF ₁₇ O ₃ S (ПФОС)	500	Bioaccumulation factor, log ₁₀ (BCF)	3,395
			Daphnia magna LC ₅₀ , -log ₁₀ (моль/л)	5,898
			Fathead Minnow LC ₅₀ , log ₁₀ (ммоль/л)	-2,712
			Tetrahymena pyriformis IGC ₅₀ , -log ₁₀ (моль/л)	1,841
2	C ₇ F ₁₅ COOH (ПФОК)	414	Bioaccumulation factor, log ₁₀ (BCF)	3,090
			Daphnia magna LC ₅₀ , -log ₁₀ (моль/л)	4,839
			Fathead Minnow LC ₅₀ , log ₁₀ (ммоль/л)	-2,915
			Tetrahymena pyriformis IGC ₅₀ , -log ₁₀ (моль/л)	2,009
3	C ₈ H ₁₇ OSO ₃ Na (октилсульфат натрия)	232	Bioaccumulation factor, log ₁₀ (BCF)	1,590
			Daphnia magna LC ₅₀ , -log ₁₀ (моль/л)	4,991
			Fathead Minnow LC ₅₀ , log ₁₀ (ммоль/л)	-2,636
			Tetrahymena pyriformis IGC ₅₀ , -log ₁₀ (моль/л)	1,478
4	C ₈ H ₁₇ OSO ₃ Na (изогептилсульфат натрия)	232	Bioaccumulation factor, log ₁₀ (BCF)	1,412
			Daphnia magna LC ₅₀ , -log ₁₀ (моль/л)	4,913
			Fathead Minnow LC ₅₀ , log ₁₀ (ммоль/л)	-2,462
			Tetrahymena pyriformis IGC ₅₀ , -log ₁₀ (моль/л)	1,134
5	C ₉ H ₁₉ SO ₃ Na (нонилсульфонат натрия)	230	Bioaccumulation factor, log ₁₀ (BCF)	1,554
			Daphnia magna LC ₅₀ , -log ₁₀ (моль/л)	5,244
			Fathead Minnow LC ₅₀ , log ₁₀ (ммоль/л)	-2,820
			Tetrahymena pyriformis IGC ₅₀ , -log ₁₀ (моль/л)	1,615
6	C ₁₂ H ₂₅ C ₆ H ₄ SO ₃ Na (додецилбензолсульфонат натрия)	348	Bioaccumulation factor, log ₁₀ (BCF)	1,924
			Daphnia magna LC ₅₀ , -log ₁₀ (моль/л)	5,112
			Fathead Minnow LC ₅₀ , log ₁₀ (ммоль/л)	-2,979
			Tetrahymena pyriformis IGC ₅₀ , -log ₁₀ (моль/л)	2,168
7	C ₁₇ H ₃₃ COOH (олеиновая кислота)	282	Bioaccumulation factor, log ₁₀ (BCF)	1,661
			Daphnia magna LC ₅₀ , -log ₁₀ (моль/л)	5,051
			Fathead Minnow LC ₅₀ , log ₁₀ (ммоль/л)	-4,343
			Tetrahymena pyriformis IGC ₅₀ , -log ₁₀ (моль/л)	3,101
8	C ₁₇ H ₃₃ COOH (ундецилциклогексановая кислота)	282	Bioaccumulation factor, log ₁₀ (BCF)	1,991
			Daphnia magna LC ₅₀ , -log ₁₀ (моль/л)	4,632
			Fathead Minnow LC ₅₀ , log ₁₀ (ммоль/л)	-3,278
			Tetrahymena pyriformis IGC ₅₀ , -log ₁₀ (моль/л)	2,459
9	C ₁₇ H ₃₃ CONHC ₂ H ₄ OH (моноамид олеиновой кислоты)	326	Bioaccumulation factor, log ₁₀ (BCF)	1,420
			Daphnia magna LC ₅₀ , -log ₁₀ (моль/л)	4,797
			Fathead Minnow LC ₅₀ , log ₁₀ (ммоль/л)	-3,827
			Tetrahymena pyriformis IGC ₅₀ , -log ₁₀ (моль/л)	2,189
10	C ₁₇ H ₃₃ CONHC ₂ H ₄ OH (моноамид ундецилциклогексановой кислоты)	326	Bioaccumulation factor, log ₁₀ (BCF)	1,194
			Daphnia magna LC ₅₀ , -log ₁₀ (моль/л)	4,559
			Fathead Minnow LC ₅₀ , log ₁₀ (ммоль/л)	-3,166
			Tetrahymena pyriformis IGC ₅₀ , -log ₁₀ (моль/л)	1,947
11	HO(CH ₂) ₂ NH ₂ (этанолламин)	61	Bioaccumulation factor, log ₁₀ (BCF)	0,745
			Daphnia magna LC ₅₀ , -log ₁₀ (моль/л)	1,282
			Fathead Minnow LC ₅₀ , log ₁₀ (ммоль/л)	1,115
			Tetrahymena pyriformis IGC ₅₀ , -log ₁₀ (моль/л)	-1,780

Таблица 2 – Острая токсичность для крыс

№ п/п	Вещество	Rat IP LD ₅₀ (мг/кг)	Rat IV LD ₅₀ (мг/кг)	Rat Oral LD ₅₀ (мг/кг)	Rat SC LD ₅₀ (мг/кг)
1	C ₈ HF ₁₇ O ₃ S (ПФОС)	77,12 in AD	144,70 in AD	1458,0 in AD	248,6 in AD
2	C ₇ F ₁₅ COOH (ПФОК)	172,80 in AD	358,10 in AD	499,8 out of AD	594,2 in AD
3	C ₈ H ₁₇ OSO ₃ Na (октилсульфат натрия)	114,00 in AD	34,89 in AD	1165,0 in AD	249,0 in AD
4	C ₈ H ₁₇ OSO ₃ Na (изогептилсульфат натрия)	149,30 in AD	24,43 in AD	707,4 in AD	144,9 in AD
5	C ₉ H ₁₉ SO ₃ Na (нонилсульфонат натрия)	96,80 in AD	50,83 in AD	1101,0 in AD	349,2 in AD
6	C ₁₂ H ₂₅ C ₆ H ₄ SO ₃ Na (додецилбензолсульфонат натрия)	1438,00 in AD	155,00 in AD	1496,0 in AD	1462,0 in AD
7	C ₁₇ H ₃₃ COOH (олеиновая кислота)	4765,00 out of AD	825,70 in AD	5302,0 in AD	3555,0 in AD
8	C ₁₇ H ₃₃ COOH (ундецилциклогексановая кислота)	1171,00 in AD	370,80 in AD	3678,0 in AD	1983,0 in AD
9	C ₁₇ H ₃₃ CONHC ₂ H ₄ OH (моноамид олеиновой кислоты)	1350,00 in AD	352,20 in AD	4925,0 in AD	4964,0 in AD
10	C ₁₇ H ₃₃ CONHC ₂ H ₄ OH (моноамид ундецилциклогексановой кислоты)	548,30 in AD	196,80 in AD	2166,0 in AD	2376,0 in AD
11	HO(CH ₂) ₂ NH ₂ (этанолламин)	859,40 in AD	537,40 in AD	2347,0 in AD	1086,0 in AD

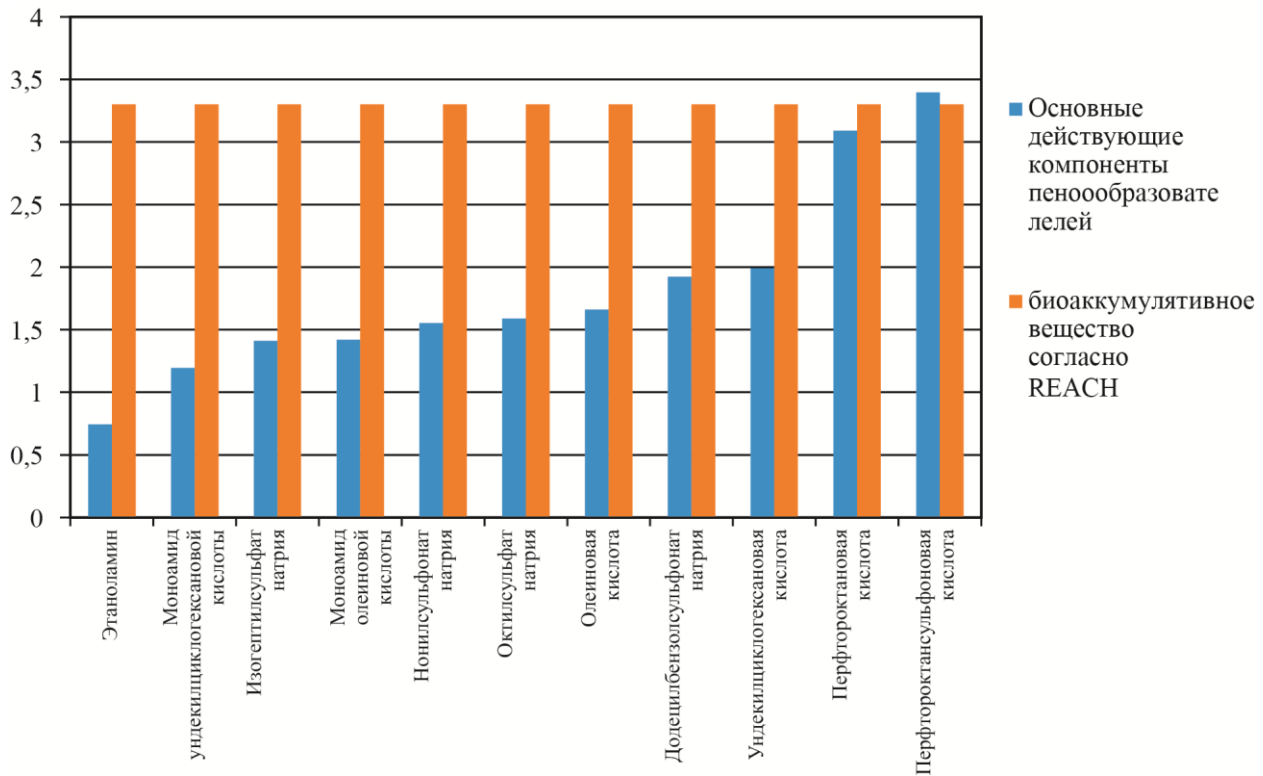


Рисунок 12 – Значения рассчитанных BCF исследуемых веществ и значение критерия биоаккумулятивности вещества согласно REACH [26]

Сравнение полученных результатов с критериями острой токсичности СГС[25] показало (рис. 13), что, только ПФОС относится к 1 классу острой токсичности, тогда как остальные исследуемые компоненты пенообразователей и продукты их разложения, за исключением этаноламина, который не обладает острой токсичностью, и относятся ко 2 классу острой токсичности.

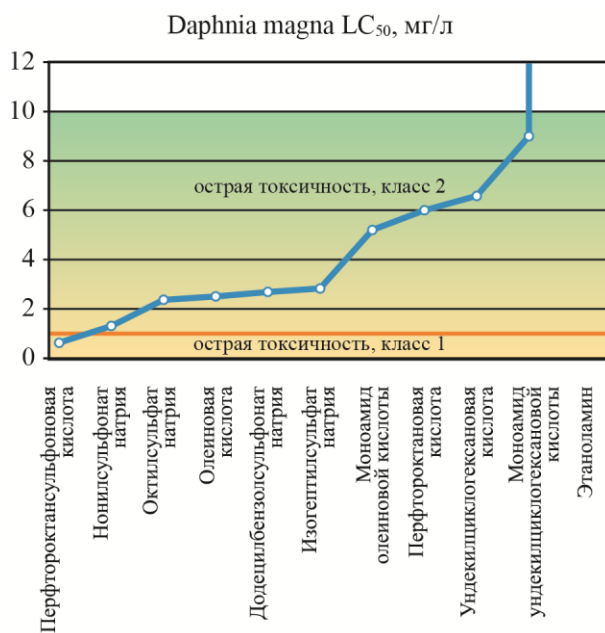


Рисунок 13 – Значения LC₅₀ (мг/л) по воздействию исследуемых соединений на Daphnia magna

Сравнение полученных данных острой токсичности (табл. 2) по воздействию на человека при пероральном пути их попадания в организм согласно СГС [25] представлено на рис. 14.

Анализ результатов, приведенных на рис. 14, показывает, что большинство исследуемых соединений относится к 4 и 5 классам острой опасности при пероральном пути их попадания в организм.

При дермальном (кожном) воздействии на организм наблюдается несколько другая ситуация (рис. 15).

Имеет место большой разброс по классам опасности для исследуемых соединений. Причем, как видно из представленных данных, пенообразователи на основе нефтяных кислот и продукты их разложения более безопасны для человека (5 класс острой токсичности), чем пенообразователи на основе ПАВ и фторсодержащих соединений (2–4 классы опасности острой токсичности).

Таким образом, сравнение фторсодержащих пенообразователей и пенообразователей на основе ПАВ с пенообразователями на основе аминных комплексов нефтяных кислот показало, что продукты разложения пенообразователей на основе нефтяных кислот зачастую не хуже, а иногда и более безопасны для окружающей среды и человека, чем сами исходные вещества и другие пенообразователи. Учитывая большую безопасность для окружающей среды продуктов термического разложения пенообразователей на основе нефтяных кислот, рекомендуется их применение в пожаротушении в количестве, минимально достаточном для тушения пожара, а не в избытке.

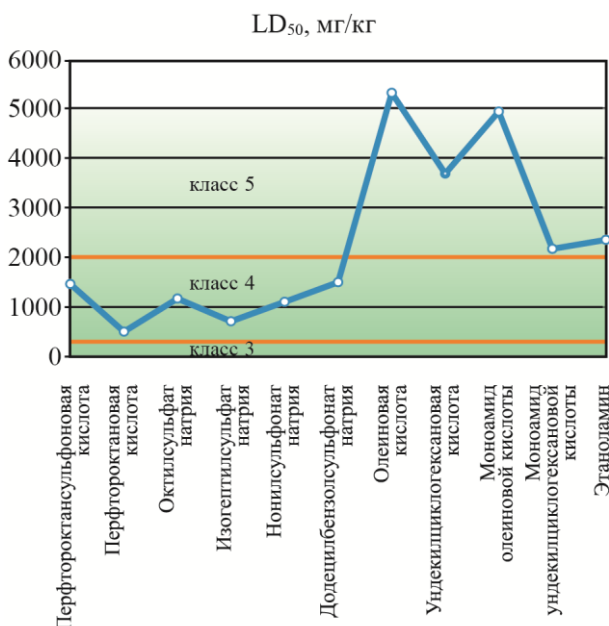


Рисунок 14 – Значения LD₅₀ (мг/кг) по воздействию исследуемых соединений на человека при пероральном пути их попадания в организм

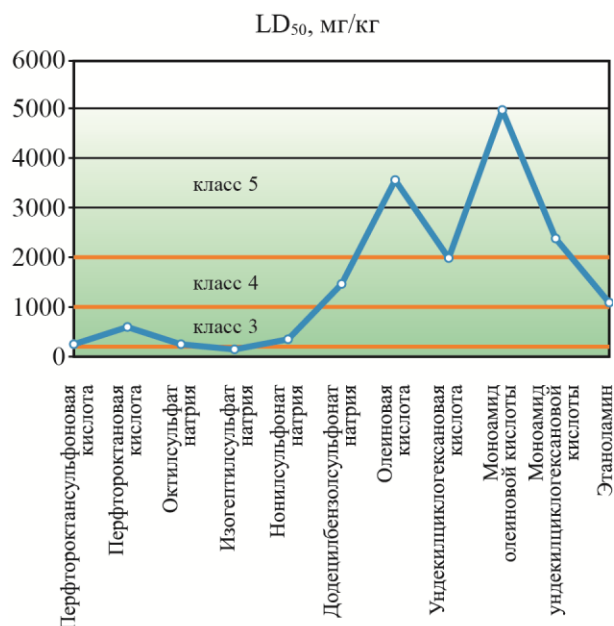


Рисунок 15 – Значения LD₅₀ (мг/кг) по воздействию исследуемых соединений на человека при дермальном воздействии на организм

Выводы

В работе теоретически обосновано использование метода для анализа экологических характеристик основных органических компонентов пенообразователей – метода 2D QSAR в приложении GUSAR. Использование данного метода в приложении GUSAR позволяет учесть взаимосвязь структуры и экологических свойств используемых в пожаротушении основных органических компонентов пенообразователей.

Сравнительный анализ экологических характеристик фторсодержащих пенообразователей и пенообразователей на основе поверхностно

активных веществ с пенообразователями на основе аминных комплексов нафтеновых кислот показал, что продукты разложения пенообразователей на основе нафтеновых кислот зачастую не хуже, а иногда и более безопасны для окружающей среды и человека, чем сами исходные вещества и исследуемые в работе другие пенообразователи. Учитывая большую безопасность для окружающей среды продуктов термического разложения пенообразователей на основе нафтеновых кислот, рекомендовано их применение в пожаротушении в количестве, минимально достаточном для тушения пожара, а не в избытке.

ЛИТЕРАТУРА

1. Шрайбер Г., Порст П. Огнетушащие средства. Химико-физические процессы при горении и тушении. Пер. с нем. М.: Стройиздат, 1975. 240 с.
2. Dadashov I., Loboichenko V., Kireev A. Analysis of the ecological characteristics of environment friendly fire fighting chemicals used in extinguishing oil products. *Pollution Research*, 2018. Vol. 37, Issue 1. Pp. 63-77.
3. Holemman H. Environmental problems caused by fires and fire-fighting agents. *Fire safety science – Proceedings of the fourth international symposium*, 1994. Pp. 61-77. URL: <http://www.iafss.org/publications/fss/4/61/view> (access date: 12.03.2020).
4. Loboichenko V., Strelets V., Gurbanova M., Morozov A., Kovalov P., Shevchenko R., Kovalova T., Ponomarenko R. Review of the environmental characteristics of fire extinguishing substances of different composition used for fires extinguishing of various classes. *Journal of Engineering and Applied Sciences*, 2019. No. 14. Pp. 5925-5941.
5. United Nations. The Stockholm Convention on Persistent Organic Pollutants. Entered into force on 17 May 2004. Stockholm, Sweden. URL: <http://chm.pops.int/TheConvention/Overview/TextoftheConvention/tabid/2232/Default.aspx> (access date: 12.03.2020).
6. Дадашов И. Ф., Киреев А. А., Жерноклёв К. В. Пути повышения экологических характеристик средств тушения горючих жидкостей. *Техногенно-экологічна безпека*, 2017. Вип. 1. С. 39-43.
7. Безродный И. Ф. Экология пожаротушения – пока это только слова. *Пожаровзрывобезопасность*, 2013. Т. 22, № 6. С. 85-89.
8. Абрамов Ю. А., Киреев А. А. Гелеобразующие огнетушащие и огнезащитные средства повышенной эффективности применительно к пожарам класса А. Х.: НУГЗУ, 2015. 254 с.
9. Дадашов И. Ф., Михеенко Л. А., Киреев А. А. Выбор лёгкого силикатного носителя для гелевогоогнетушащего слоя при пожаротушении. *Керамика: наука и жизнь*, 2016. №2 (31). С. 44-51.
10. Абдурагимов И. М., Куприн Г. Н., Куприн Д. С. Быстротвердеющие пены – новая эра в борьбе с лесными пожарами. *Пожары и чрезвычайные ситуации: предотвращение, ликвидация*, 2016. № 2. С. 7-13.
11. Cortina T., Korzeniowski St. AFFF industry in position to exceed environmental goals. *ASIA PACIFIC FIRE Magazine*, 2008. Issue 26. Pp. 17-22.
12. Tureková I., Balog K. The environmental impacts of fire-fighting foams. *Research Papers Faculty of Materials Science and Technology Slovak University of Technology*, 2010. No. 18(29). Pp. 111-120. doi: 10.2478/v10186-010-0033-z.

13. Hribova S., Gargosova H., Vavrova M. Ecotoxicological evaluation of fire fighting foams. *Fresenius Environmental Bulletin*, 2014. Vol. 23, No. 12. Pp. 3029-3035.
14. Kawano T., Otsuka K., Kadono T., Inokuchi R., Ishizaki Y., Dewancker B., Uezu K. Eco-toxicological evaluation of fire-fighting foams in small-sized aquatic and semi-aquatic biotopes. *Advanced Materials Research*, 2014. Vol. 875-877. Pp. 699-707.
15. Kawahara T., Hatae Sh., Kanyama T., Ishizaki Y., Uezu K. Development of eco-friendly soap-based firefighting foam for forest fire. *Environmental Control in Biology*, 2016. 54(1). Pp. 75-78. doi: 10.2525/ ECB.54.75.
16. Бочаров, В. В., Раевская М. В. Использование перфторированных ПАВ в пенообразователях – «второе пришествие» галогенорганики с наилучшим сценарием развития для обитателей Земли. *Пожаровзрывобезопасность*, 2013. Т. 22, № 10. С. 75-82.
17. Tureková I., Balog K., Pólka M. The effect fire fighting foams on the environment and fire extinguishing. *Bezpečnost i Technika Požarnictva*, 2012. Vol. 25. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/the-effect-of-fire-fighting-foams-on-the-environment-and-fire-extinguishing/viewer> (access date: 12.03.2020).
18. Montagnoli R. N., Lopes P. R. M., Cruz J. M., Claro E. M. T., Quiterio G. M., Bidoia E. D. The effects of fluoride based fire-fighting foams on soil microbiota activity and plant growth during natural attenuation of perfluorinated compounds. *Environmental Toxicology and Pharmacology*, 2017. Vol. 50. Pp. 119-127.
19. Laitinen J. A., Koponen J., Koikkalainen J., Kiviranta H. Firefighters' exposure to perfluoroalkyl acids and 2-butoxyethanol present in firefighting foams. *Toxicology Letters*, 2014. Vol. 231, Issue 2. Pp. 227-232.
20. Rotander A., Toms L.-M. L., Aylward L., Kay M., Mueller J. F. Elevated levels of PFOS and PFHxS in firefighters exposed to aqueous film forming foam (AFFF). *Environment International*, 2015. Vol. 82. Pp. 28-34.
21. Kärrman A., Bjurlid F., Hagberg J., Ricklund N., Larsson M., Stubleski J., Hollert H. Study of environmental and human health impacts of firefighting agents. A technical report. MTM Research Centre, School of Science and Technology, Örebro University, Sweden, 2016. URL: <https://oru.diva-portal.org/smash/get/diva2:1068268/FULLTEXT01.pdf> (access date: 12.03.2020).
22. Fighting fire with fluorine-free foams. European Chemicals Agency. URL: <https://echa.europa.eu/fluorine-free-foams> (access date: 12.03.2020).
23. Winnebeck K. Per- and Polyfluorinated Substances in Firefighting Foam. New York State Pollution Prevention Institute. Rochester Institute of Technology, 2019. 75 p. URL: http://theic2.org/article/download-pdf/file_name/Per_and_Polyfluorinated_Substances_in_Firefighting_Foam_040919.pdf (access date: 12.03.2020).
24. Database of the European Chemicals Agency. URL: <https://echa.europa.eu/home> (access date: 12.03.2020).
25. Согласованная на глобальном уровне система классификации и маркировки химических веществ (СГС). Шестое пересмотренное издание. Организация Объединенных Наций, 2017. URL: http://www.unece.org/ru/trans/danger/publi/ghs/ghs_rev07/07files_e0.html (access date: 12.03.2020).
26. Arnot J. A., Gobas F. A review of bioconcentration factor (BCF) and bioaccumulation factor (BAF) assessments for organic chemicals in aquatic organisms. *Environmental Reviews*, 2006. Vol. 14, No. 4. Pp. 257-297. doi: 10.1139/A06-005.
27. Gobas F. A. P. C. Assessing bioaccumulation factors of persistent organic pollutants in aquatic foodchains. *Harrad S. (ed.) Persistent Organic Pollutants*. New York, Springer Science+Business Media, 2001. Pp. 145-165. doi: 10.1007/978-1-4615-1571-5_6.
28. REACH. Регламент (ЕС) №1907/2006 Европейского Парламента и Совета ЕС от 18 декабря 2006 г., касающийся правил регистрации, оценки, санкционирования и ограничения химических веществ. URL: <https://dokipedia.ru/document/5180853> (дата обращения: 12.03.2020).
29. OECD. Introduction to (Quantitative) Structure Activity Relationships. URL: <https://www.oecd.org/chemicalsafety/risk-assessment/introductiontoquantitativestructureactivityrelationships.htm> (access date: 12.03.2020).
30. Бессарабов В. И., Вахитова Л. М., Таран Н. А., Прудченко А. П., Придятько С. П. Визначення екологічних характеристик вогнезахисних інтумесцентних покриттів при додаванні наноглини. *Вісник Донецького гірничого інституту*, 2017. № 1. С. 90-100.
31. Cherkasov A., Muratov E. N., Fourches D., Varnek A., Baskin I. I., Cronin M., Dearden J., Gramatica P., Martin Y. C., Todeschini R., Consonni V., Kuz'min V. E., Cramer R., Benigni R., Yang C., Rathman J., Terfloth L., Gasteiger J., Richard A., Tropsha A. QSAR Modeling: Where Have You Been? Where Are You Going To? *Journal of Medicinal Chemistry*, 2014. Vol. 57, Issue 12. Pp. 4977-5010. doi: 10.1021/jm4004285.
32. Разработка универсального набора функций, позволяющих описывать свойства молекул. URL: https://studbooks.net/2289081/matematika_himija_fizika/literaturnyy_obzor (дата обращения: 12.03.2020).
33. Perkins R., Fang H., Tong W., Welsh W. J. Quantitative structure activity relationship methods: Perspectives on drug discovery and toxicology. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 2003. Vol. 22, Issue 8. Pp. 1666-1679. doi: 10.1897/01-171.
33. Filimonov D. A., Zakharov A. V., Lagunin A. A., Poroikov V. V. QNA based "Star Track" QSAR approach. *SAR and QSAR Environmental Research*, 2009. Vol. 20, Issue (7-8). Pp. 679-709.
34. GUSAR online. URL: <http://www.way2drug.com/gusar/index.html> (access date: 12.03.2020).
35. Бочаров В. В., Раевская М. В. Пенообразователи для тушения пожаров на основе перфторированных ПАВ. Оценка их биоразлагаемости и возможных методов утилизации. *Вестник российских университетов. Математика*, 2014. Т. 19, № 5. С. 1384-1387.
36. Бочаров В. В., Раевская М. В. О возможностях каталитического окисления перфторированных ПАВ при обезвреживании стоков, образующихся после пожаротушения. *Экология и защита окружающей среды: сб. тез. докл. Междунар. науч.-практ. конф., 19-20 марта 2014 г. Минск, 2014. С. 90-95. URL: http://elib.bsu.by/handle/123456789/103363* (дата обращения: 12.03.2020).
37. PubChem. URL: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov> (access date: 12.03.2020).
38. Тайсумов Х. А. Состав термостойкой пены для профилактики и тушения пожаров с использованием морской воды красного моря. *Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований*, 2018. № 2. С. 49-52.
39. Шароварников А. Ф., Шароварников С. А. Пенообразователи и пены для тушения пожаров. Состав, свойства, применение. М.: Пожнаука, 2005. 335 с.
40. Аббасов В. М., Исмаилов Т. А., Абдуллаев С. Е. Улучшение качества пенообразователя, полученного на основе аминных комплексов нефтяных кислот. *Процессы нефтехимии и нефтепереработки*, 2008. № 3-4 (35-36). С. 203-207.
41. Məmmədova T. A., Qurbanova M. Ə. Təbii neft turşularının etanolamin komplekslərinin köpükəmələgətirmə qabiliyyətinə səthi aktiv maddələrin təsirinin tədqiqi. *Journal of Baku Engineering University. Chemistry and Biology*, 2019. Vol. 2. P. 64-70.

Gurbanova M., Loboichenko V., Shevchenko R., Dadashov I.**ANALYSIS OF ENVIRONMENTAL CHARACTERISTICS OF THE BASIC ORGANIC COMPONENTS OF THE FOAMING AGENT USED IN FIRE FIGHTING**

The influence of fire-fighting foaming agents containing fluorine and fluorine-free on the environment and humans is analysed. The negative effect of the decay products of fluorinated foaming agents on the fire-fighter's, plant and animal organisms is shown. Insufficient data on the environmental impact of fluorine-free foams used in fire fighting are noted. It is theoretically justified to use for the analysis of environmental parameters of fire fighting foams one of the calculation methods of Quantitative Structure Property Relationships (QSAR), based on the construction of quantitative relations "structure of a substance – property of a substance". A number of environmental characteristics of the basic organic components of the fire fighting foams were determined in the GUSAR application based on their 2D structural formulas. As the basic components of the foaming agents, individual representatives of primary and secondary sodium alkyl sulphates, sodium alkyl sulphonates, sodium alkylaryl sulphonates and naphthenic acids have been studied. The values of LC₅₀ (fathead minnow (*Pimephales promelas*)), LC₅₀ (*Daphnia magna*), IGC₅₀ (*Tetrahymena pyriformis*), and BCF (bioaccumulation factor) were obtained for these compounds. Acute toxicity to rats (LD₅₀) was also determined for different routes of entry of the compound into the animal. It was shown that most of the investigated components of the foaming agents and their decomposition products (except PFOS and ethanolamine) belong to the class 2 of acute toxicity.

It was found that foaming agents based on naphthenic acids and their decomposition products are safer for humans than foaming agents based on investigated surfactants and fluorine-containing compounds. It was demonstrated that the decomposition products of naphthenic acid-based foaming agents are no worse and sometimes safer for the environment and humans than the source products themselves and other foaming agents.

Key words: foaming agent, calculation methods, environmental characteristic, fire fighting, structural formula.

REFERENCES

- Shrajber, G., Porst, P. (1975). Ognetushashhie sredstva. Himiko-fizicheskie processy pri gorenii i tushenii. Per. s nem. M.: Strojizdat, 240.
- Dadashov, I., Loboichenko, V., Kireev, A. (2018). Analysis of the ecological characteristics of environment friendly fire fighting chemicals used in extinguishing oil products. *Pollution Research*, 37/1, 63-77.
- Holemann, H. (1994). Environmental problems caused by fires and fire-fighting agents. *Fire safety science – Proceedings of the fourth international symposium*, 61-77. Available: <http://www.iafss.org/publications/fss/4/61/view>.
- Loboichenko, V., Strelets, V., Gurbanova, M., Morozov, A., Kovalov, P., Shevchenko, R., Kovalova, T., Ponomarenko, R. (2019). Review of the environmental characteristics of fire extinguishing substances of different composition used for fires extinguishing of various classes. *Journal of Engineering and Applied Sciences*, 14, 5925-5941.
- United Nations. (2004). The Stockholm Convention on Persistent Organic Pollutants. Entered into force on 17 May 2004. Stockholm, Sweden. Available: <http://chm.pops.int/TheConvention/Overview/TextoftheConvention/tabid/2232/Default.aspx>.
- Dadashov, I. F., Kireev, A. A., Zhernokljov, K. V. (2017). Puti povysheniya jekologicheskikh karakteristik sredstv tusheniya gorjuchih zhidkostej. *Tehnogenno-ekologichna bezpeka*, 1, 39-43.
- Bezrodnij, I. F. (2013). Jekologija pozharotusheniya – poka jeto tol'ko slova. *Pozharozvrybobezopasnost'*, 22/6, 85-89.
- Abramov, Ju. A., Kireev, A. A. (2015). Geleobrazujushhie ognetushashhie i ogneszashhitnye sredstva povyshennoj jeffektivnosti primenitel'no k pozharom kllassa A. Har'kov, NUGZU, 254.
- Dadashov, I. F., Miheenko, L. A., Kireev, A. A. (2016). Vybór ljogkogo silikatnogo nositelja dlja gelevogoognetushashhego sloja pri pozharotushenii. *Keramika: nauka i zhizn'*, №2 (31), 44-51.
- Abduragimov, I. M., Kuprin, G. N., Kuprin, D. S. (2016). Bystrotverdejuushhie peny – novaja jera v bor'be s lesnymi pozharami. *Pozhary i chrezvyčajnye situacii: predotvrashhenie, likvidacija*, 2, 7-13.
- Cortina, T., Korzeniowski, St. (2008) AFFF industry in position to exceed environmental goals. *ASIA PACIFIC FIRE Magazine*, 26, 17-22.
- Tureková, I., Balog, K. (2010). The environmental impacts of fire-fighting foams. *Research Papers Faculty of Materials Science and Technology Slovak University of Technology*, 18(29), 111-120. doi: 10.2478/v10186-010-0033-z.
- Hribova, S., Gargosova, H. Vavrova, M. (2014). Ecotoxicological evaluation of fire fighting foams. *Fresenius Environmental Bulletin*, 23/12, 3029-3035.
- Kawano, T., Otsuka, K., Kadono, T., Inokuchi, R., Ishizaki, Y., Dewancker, B., Uezu, K. (2014). Eco-toxicological evaluation of fire-fighting foams in small-sized aquatic and semi-aquatic biotopes. *Advanced Materials Research*, 875-877, 699-707.
- Kawahara, T., Hatae, Sh., Kanyama, T., Ishizaki, Y., Uezu, K. (2016). Development of eco-friendly soap-based firefighting foam for forest fire. *Environmental Control in Biology*, 54(1), 75-78. doi: 10.2525/ecb.54.75.
- Bocharov, V. V., Raevskaja M. V. (2013). Ispol'zovanie perflorirovannyh PAV v penoobrazovateljah – «vtoroe prishestvie» galogenorganiki s naihdshim scenariem razvitiya dlja obitatelej Zemli. *Pozharozvrybobezopasnost'*, 22/10, 75-82.
- Tureková, I., Balog, K., Pólka, M. (2012). The efekt fire fighting foams on the environment and fire extinguishing. *Bezpieczeństwo i Technika Pożarnicza*, 25. Available: <https://cyberleninka.ru/article/n/the-effect-of-fire-fighting-foams-on-the-environment-and-fire-extinguishing/viewer>.
- Montagnoli, R. N., Lopes, P. R. M., Cruz, J. M., Claro, E. M. T., Quiterio, G. M., Bidoia, E. D. (2017). The effects of fluoride based fire-fighting foams on soil microbiota activity and plant growth during natural attenuation of perfluorinated compounds. *Environmental Toxicology and Pharmacology*, 50, 119-127.
- Laitinen, J. A., Koponen, J., Koikkalainen, J., Kiviranta, H. (2014). Firefighters' exposure to perfluoroalkyl acids and 2-butoxyethanol present in firefighting foams. *Toxicology Letters*, 231/2, 227-232.
- Rotander, A., Toms, L.-M. L., Aylward, L., Kay, M., Mueller, J. F. (2015). Elevated levels of PFOS and PFHxS in firefighters exposed to aqueous film forming foam (AFFF). *Environment International*, 82, 28-34.
- Kärman, A., Bjurlid, F., Hagberg, J., Ricklund, N., Larsson, M., Stubleski, J., Hollert, H. (2016). Study of environmental and human health impacts of firefighting agents. A technical report. MTM Research Centre, School of Science and Technology, Örebro University, Sweden. Available: <https://oru.diva-portal.org/smash/get/diva2:1068268/FULLTEXT01.pdf>.
- Fighting fire with fluorine-free foams. European Chemicals Agency. Available: <https://echa.europa.eu/fluorine-free-foams>.
- Winnebeck, K. (2019). Per- and Polyfluorinated Substances in Firefighting Foam. New York State Pollution Prevention Institute. Rochester Institute of Technology, 75. Available: http://theic2.org/article/download-pdf/file_name/Per_and_Polyfluorinated_Substances_in_Firefighting_Foam_040919.pdf.
- Database of the European Chemicals Agency. Available: <https://echa.europa.eu/home>.
- United Nations. (2017). Soglasovannaja na global'nom urovne sistema klassifikacii i markirovki himicheskikh veshhestv (SGS). Shestoe peresmotrennoe izdanie. Available: http://www.unece.org/ru/trans/danger/publi/ghs/ghs_rev07/07files_e0.html.
- Arnot, J. A., Gobas, F. (2006). A review of bioconcentration factor (BCF) and bioaccumulation factor (BAF) assessments for organic chemicals in aquatic organisms. *Environmental Reviews*, 14/4, 257-297. doi: 10.1139/A06-005.
- Gobas, F. A. P. C. (2001). Assessing bioaccumulation factors of persistent organic pollutants in aquatic foodchains. In: Harrad S. (ed.) *Persistent Organic Pollutants*. New York, Springer Science+Business Media, 145-165. doi: 10.1007/978-1-4615-1571-5_6.
- REACH. (2006). Reglament (ES) №1907/2006 Evropejskogo Parlamenta i Soveta ES ot 18 dekabnja 2006 g., kasajushhijstva pravil registracii, ocenki, sankcionirovanija i ogranichenija himicheskikh veshhestv. Available: <https://dokipedia.ru/document/5180853>.

29. OECD. Introduction to (Quantitative) Structure Activity Relationships. Available: <https://www.oecd.org/chemicalsafety/risk-assessment/introductiontoquantitativestructureactivityrelationships.htm>.
30. Bessarabov, V. I., Vahitova, L. M., Taran, N. A., Prudchenko, A. P., Prydat'ko, S. P. (2017). Vyznachennja ekologichnyh harakterystyk vognazahysnyh intumescentnyh pokryttiv pry dodavanni nanoglyn. Visti Donec'kogo girnychogo instytutu, 1, 90-100.
31. Cherkasov, A., Muratov, E. N., Fourches, D., Varnek, A., Baskin, I. I., Cronin, M., Dearden, J., Gramatica, P., Martin, Y. C., Todeschini, R., Consonni, V., Kuz'min, V. E., Cramer, R., Benigni, R., Yang, C., Rathman, J., Terfloth, L., Gasteiger, J., Richard, A., Tropsha, A. (2014). QSAR Modeling: Where Have You Been? Where Are You Going To? Journal of Medicinal Chemistry, 57/12, 4977-5010. doi: 10.1021/jm4004285.
32. Razrabotka universal'nogo nabora funkcij, pozvoljajushih opisyvat' svojstva molekul. Available: https://studbooks.net/2289081/matematika_himiya_fizika/literaturnyy_obzor.
33. Perkins, R., Fang, H., Tong, W., Welsh, W. J. (2003). Quantitative structure activity relationship methods: Perspectives on drug discovery and toxicology. Environmental Toxicology and Chemistry, 22/8, 1666-1679. doi: 10.1897/01-171.
33. Filimonov, D. A., Zakharov, A. V., Lagunin, A. A., Poroikov, V. V. (2009). QNA based "Star Track" QSAR approach. SAR and QSAR Environmental Research, 20/(7-8), 679-709.
34. GUSAR online. Available: <http://www.way2drug.com/gusar/index.html>.
35. Bocharov, V. V., Raevskaja, M. V. (2014). Penobrazovateli dlja tushenija pozharov na osnove perftorirovannyh PAV. Ocenka ih biorazlagaemosti i vozmozhnyh metodov utilizacii. Vestnik Rossijskix universitetov. Matematika, 19/5, 1384-1387.
36. Bocharov, V. V., Raevskaja, M. V. (2014). O vozmozhnostjakh kataliticheskogo okislenija perftorirovannyh PAV pri obezvezhivanii stokov, obrazujushhhsja posle pozharotushenija. Jekologija i zashhita okruzhajushhej sredy: sb. tez. dokl. Mezhdunar. nauch.-prakt. konf., 19-20 marta 2014 g. Minsk, 90-95. Available: <http://elib.bsu.by/handle/123456789/103363>.
37. PubChem. Available: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>.
38. Tajsumov, H. A. (2018). Sostav termostojkoj peny dlja profilaktiki i tushenija pozharov s ispol'zovaniem morskoy vody krasnogo morja. Mezhdunarodnyj zhurnal prikladnyh i fundamental'nyh issledovanij, 2, 49-52.
39. Sharovarnikov, A. F., Sharovarnikov, S. A. (2005). Penobrazovateli i peny dlja tushenija pozharov. Sostav, svojstva, primenenie. M.: Pozhnauka, 335.
40. Abbasov, V. M., Ismailov, T. A., Abdullaev, S. E. (2008). Uluchshenie kachestva penobrazovatelya, poluchennogo na osnove aminnyh kompleksov nefjtjanyh kislot. Processy neftehimii i neftepererabotki, 3-4 (35-36), 203-207.
41. Məmmədova, T. A., Qurbanova, M. Ə. (2019). Təbii neft turşularının etanolamin komplekslərinin köpükəmələgətmə qabiliyyətində səthi aktiv maddələrin təsirinin tədqiqi. Journal of Baku Engineering University. Chemistry and Biology, 2, 64-70.

Гурбанова М. А., Лобойченко В. М., Шевченко Р. І., Дадашов І. Ф.

АНАЛІЗ ЕКОЛОГІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ОСНОВНИХ ОРГАНІЧНИХ КОМПОНЕНТІВ ПІНОУТВОРЮВАЧІВ, ЩО ВИКОРИСТОВУЮТЬСЯ В ПОЖЕЖОГАСІННІ

Проаналізовано вплив піноутворювачів для пожежогасіння, тих, що містять фтор, та безфторних, на навколишнє середовище й людину. Показано негативний вплив продуктів розпаду фторвмісних піноутворювачів на організм пожежних, рослинні та тваринні організми. Відзначається недостатність даних про вплив на навколишнє середовище пін, що не містять фтор та використовуються в пожежогасінні. Теоретично обґрунтовано використання для аналізу екологічних параметрів піноутворювачів для пожежогасіння одного з розрахункових методів Quantitative Structure Property Relationships (QSAR), що базуються на побудові кількісних співвідношень «структура речовини - властивість речовини». Визначено ряд екологічних характеристик основних органічних компонентів піноутворювачів для пожежогасіння в додатку GUSAR на основі їх 2D структурних формул. Як основні компоненти піноутворювачів досліджені окремі представники первинних і вторинних алкілсульфатів натрію, алкілсульфонатів натрію, алкіларілесульфонатів натрію і нафтових кислот. Для цих сполук отримані значення LC₅₀ (fathead minnow (*Pimephales promelas*)), LC₅₀ (*Daphnia magna*), IGC₅₀ (*Tetrahymena pyriformis*) і коефіцієнт біоконцентрації BCF. Також визначена гостра токсичність для щурів (LD₅₀) за різних шляхів потрапляння сполук в організм тварини. Показано, що більшість досліджуваних компонентів піноутворювачів і продуктів їх розкладу (крім ПФОС і етаноламіну) відносяться до 2 класу гострої токсичності.

Отримано, що піноутворювачі на основі нафтових кислот і продукти їх розкладання більш безпечні для людини, ніж піноутворювачі на основі досліджених ПАР і фторвмісних сполук. Показано, що продукти розкладання піноутворювачів на базі нафтових кислот не гірші, а іноді і більш безпечні для навколишнього середовища і людини, ніж самі вихідні речовини й інші піноутворювачі.

Ключові слова: піноутворювач, розрахункові методи, екологічна характеристика, пожежогасіння, структурна формула.