

**КОМПЬЮТЕРНЫЕ ПРОГРАММЫ
ДЛЯ ОЦЕНКИ УСТОЙЧИВОСТИ,
БИОКОНЦЕНТРИРОВАНИЯ И
ТОКСИЧНОСТИ ХИМИЧЕСКИХ
ВЕЩЕСТВ.**



ЦЕЛИ ПРОГРАММЫ:

1. Найти ответ, что будет если вещество попадёт в окружающую среду: будет ли оно сосредотачиваться в воздухе , воде или почве.
2. Как долго вещество будет сохраняться в одной из этих сред (в воздухе, воде, почве или осадке).
3. Будет ли вещество создавать опасность



ПРОГРАММА PBT

Для решения поставленных целей Агентство использует сложную компьютерную программу. Эта программа модифицировалась и стала доступной для производителей химических продуктов. Она известна под названием «PBT Profiler».

Также известны другие программы помогающие сделать вывод о свойствах веществ. Это такие программы как «PASS» и «QSAR».



ПРОГРАММА РВТ

Данная программа может:

1. Устанавливать устойчивость веществ
2. Способность к накоплению в живых организмах
3. Токсичность веществ



ОПРЕДЕЛЕНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ

В программе путем расчета времени полураспада в атмосфере оценивается роль реакции взаимодействия химических веществ с окислителями – гидроксильными радикалами и озоном.

Время полураспада веществ в воде, почве и осадках определяется при использовании модуля оценки предельного биоразложения программы BIOWIN.

Программа «PBT Profiler» оценивает устойчивость интересующего химического вещества на основании имеющейся в ней базы данных и выдаёт результаты.



ОПРЕДЕЛЕНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ

При визуализации результата шрифт **зеленого цвета** указывает, что химическое вещество **неустойчивое**.

Оранжевый – устойчивое вещество.

Красный – высокоустойчивое.



НАКОПЛЕНИЕ (БИОКОНЦЕНТРИРОВАНИЕ)

Способность химического вещества накапливаться определяется путём оценки фактора биоконцентрирования. Оценочные факторы биоконцентрирования сравниваются со значениями, содержащимися в списке критериев Агентства по защите окружающей среды. Программа предсказывает фактор биоконцентрирования на основании коэффициента распределения химического вещества в системе октанол-вода, учитывая химическую структуру вещества.



НАКОПЛЕНИЕ

Шрифт **зеленого цвета** указывает на то, что в организме вещество **не будет накапливаться**,
оранжевый — низкое накопление,
красный - сильное накопление вещества.

Но при этом модель не учитывает множество факторов, влияющих на способность накопления веществ.



ТОКСИЧНОСТЬ

Программа рассматривает только потенциальную продолжительную токсичность вещества для рыб. Эта характеристика оценивается на основе структурных аналогий с веществами, для которых уже имеются данные о токсичности в водной среде.



ТОКСИЧНОСТЬ

Зеленый цвет указывает, что данное вещество имеет низкую токсичность или нетоксично вовсе,

оранжевый - средняя степень токсичности,

красный - высокая токсичность.



ПРОГРАММА PASS

Еще одной программой, способной определять опасность химических веществ для ОС является PASS. Она включает в себя выборку, содержащую более 30000 биологически активных веществ с известной биологической активностью, и охватывает более 400 фармакологических эффектов, механизмов действия, а также мутагенность, канцерогенность, тератогенность и эмбриотоксичность.



ПРОГРАММА PASS

Химическая структура описывается в виде многоуровневых атомных окрестностей. Средняя точность прогноза с помощью PASS составляет около 84%. Результаты прогноза выдаются в виде текстового файла.

Для прогнозирования спектра биологической активности веществ организован сайт <http://www.ibmh.msk.su/PASS>.



РАСЧЕТ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ВЕЩЕСТВА

Биологическая активность описывается в PASS качественным образом ("да"/"нет"). Выдаваемые результаты прогноза помимо названий активности включают в себя оценки вероятностей наличия (P_a) и отсутствия каждой активности (P_i), имеющие значения от 0 до 1. Поскольку эти вероятности рассчитываются независимо, их сумма не равна единице.



БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ТАЛИДОМИДА

Pa	Pi	Вид активности
Действия, содержащиеся в изученном спектре		
0.398	0.007	Снотворная
0.417	0.054	Анксиолитическая
0.421	0.062	Тератогенная
0.781	0.006	Модулятор цитокинов
Прогнозируемые воздействия		
0.678	0.030	Серд.-сосуд. аналептик
0.439	0.007	Антагонист нейрокинина



ПРОГРАММА PASS

Прогноз спектра биологической активности возможен для низкомолекулярных органических соединений, структура которых не сильно отличается от веществ с известной биологической активностью. Не имеет смысла прогноз для синтетических и биополимеров, для неорганических веществ.




ПРОГРАММА PASS

Также невозможно предсказать воздействие веществ с принципиально новыми мишенями действия на организм, для которых имеются данные только об 1-2 лигандах.



СРАВНЕНИЕ

РВТ	PASS
Исследуются свойства и воздействия химических веществ	
Характеристики различных веществ	Возможное воздействие на организм человека лекарственных препаратов
Оценка устойчивости вещества	Нет оценки устойчивости, только прогноз воздействия
Основные характеристики определяются по структуре, составу и строению вещества	



- Для примера можно посмотреть принцип работы программы «PBT Profiler» на примере любого химического вещества. Например возьмём ортоксилол.

Приграмма доступна через Интернет по адресу

www.pbtprofiler.net



ПРОГРАММА РВТ

.Запрос начинается с химического названия, структуры вещества или номера CAS

Для установления номера CAS можно использовать Химическую интернет-книгу по адресу <http://webbook.nist.gov/chemistry> адресу <http://webbook.nist.gov/chemistry> или базы данных американского института рака <http://cactvs.sit.nih.gov/>.

У орто-ксилола нам известен номер: 95476





Начните Новый профиль

Пользователи Профилировщик ПБТ признают, что они прочитали и согласны [Условия использования](#)

Чтобы начать использовать профилировщик ПБТ, введите номер регистратуры CAS или другой идентификатор.
Затем нажмите на кнопку 'Поиск', чтобы продолжить.

Нужна Помощь?

[Примеры](#)

[Регистрационные номера и прочие идентификаторы](#) [Обращаю ваше химических](#)
[Улыбаются обозначения](#)
[Какая функция rbt поиска Профайтера нет](#)



[Черно-белый вариант](#)

Примечание: модули оценки используется Профилировщик ПБТ были обновлены. Некоторые химикаты могут производить различные профили в предыдущих версиях.
Полный список обновлений см. в ["Что нового"](#).

*Разработанная Центром Анализа Состояния Окружающей Среды в соответствии с контрактом Управление химической безопасности и предотвращения загрязнения, Агентство США по охране окружающей среды
Компьютерные ресурсы, предоставленные ФОК Инк. Вер 2.000 Обновлено 4 Сентября 2012*

ИМЕЮЩИЙСЯ У НАС НОМЕР ОРТО-КСИЛОРА В
ПОЛЕ ДЛЯ ИДЕНТИФИКАТОРА.





Ввод Данных

Оценка стойкости, биоаккумуляции и токсичности бензола, 1,2-диметил - запустив Профайлер ПБТ

[Start the PBT Profiler](#)

Или


Построить список химических веществ для профилирования добавив еще один номер регистратуры CAS или другой идентификатор:

Поиск

[Обращаю ваше химическим](#)



Перечень веществ, для профилирования

# Номер CAS	Название	Улыбается
1 95476	<input type="text" value="Benzene, 1,2-dimethyl-"/>	c(c(ccc1c)(C1)c 

[Черно-белый вариант](#)

Примечание: модули оценки используется Профилировщик ПБТ были обновлены. Некоторые химикаты могут производить различные профили в предыдущих версиях. Полный список обновлений см. в "[Что нового](#)".

ПОСЛЕ ВВОДА ИДЕНТИФИКАТОРА ПОИСКА ПО ПОИСКОВОМУ СПИСКУ ПРЕДЛАГАЕТСЯ ИМЕЮЩЕЕСЯ ПОД ЭТИМ НОМЕРОМ ВЕЩЕСТВО ИЗ БАЗЫ ДАННЫХ. ЕСЛИ ЭТО ТО ВЕЩЕСТВО, КОТОРОЕ МЫ ИЩЕМ, МЫ МОЖЕМ ОЦЕНИТЬ ПО ВОЗМОЖНЫМ ПАРАМЕТРАМ (СТОЙКОСТИ, ТОКСИЧНОСТИ И НАКОПЛЕНИИ)



Результаты

Оранжевый или красный моменты указывают на то, что ЭПК критерии были превышены.
[Черно-белый вариант](#)



Начните Новый профиль

Добавить больше химических веществ, чтобы Ваш профиль

Результаты Профайлера ПБТ доступны в течение 20 минут

Примечание: модули оценки используется Профилировщик ПБТ были обновлены. Некоторые химикаты могут производить различные профили в предыдущих версиях. Полный список обновлений см. в "[Что нового](#)".

Разработанная Центр Анализа Состояния Окружающей Среды в соответствии с контрактом Управление химической безопасности и предотвращения загрязнения, Агентство США по охране окружающей среды
 Компьютерные ресурсы, предоставленные ФОК Инж. Вер 2.000 Обновлено 4 Сентября 2012

ПРИ ПОЛУЧЕНИИ РЕЗУЛЬТАТОВ МЫ ВИДИМ, ЧТО ОРТО-КСИЛОЛ НЕ УСТОЙЧИВ, ОБЛАДАЕТ НИЗКОЙ ВОЗМОЖНОСТЬЮ К НАКОПЛЕНИЮ, НО ПРИ ЭТОМ ОБЛАДАЕТ СРЕДНИМ УРОВНЕМ ТОКСИЧНОСТИ.



Настойчивость Резюме

Перегородки	<p>Профилировщик ПБТ используются три природных средах (вода, почва и отложения), чтобы определить стойкость вещества в окружающей среде. Если попадут в окружающую среду, бензол, 1,2-диметил - ожидается встречается преимущественно в почве. Ожидается также можно найти в воде и отложениях .</p> <p>Профилировщик ПБТ явно не считают судьбу химического вещества в атмосфере, ее оценка сохраняемости. Он также не считает потенциальной химической войти грунтовых вод. Важно P2 соображения в этих СМИ могут обсуждаться на химические химические основы последующих разделов.</p>
Трансформация и Настойчивость	<p>Профилировщик ПБТ оценкам бензол, 1,2-диметил - ожидается встречается преимущественно в почве и ее оценка сохраняемости на основе его трансформации в этой среде. Его период полураспада в почве-30 дней, не превышают критерии ЭПК. Поэтому, бензол, 1,2-диметил - оценивается не быть стойким в окружающей среде.</p>
Загрязнение Профилактика Соображения	<p>Смета Профилировщик ПБТ настойчивость в осадок от ее потенциал для биодеградации в анаэробной (безкислородной) среде. Грунтовые воды также анаэробный отсек. Химические вещества могут вымываться через почву и ввод подземных вод в зависимости от их физико-химических свойств. Профилировщик ПБТ подсчитал, что физические и химические свойства бензола, 1,2-диметил - указывают, что оно может иметь потенциал для выщелачивания через почву и введите грунтовых вод. Предотвращение загрязнения (P2) возможности для этой смеси также следует учитывать потенциальные транспорта и сохранением в подземных водах. Профилировщик ПБТ явно не считают подземных вод в расчетной стойкости.</p>
В целом Настойчивость	<p>В общей стойкости рассчитывается срок, который позволяет сохранение различных химикатов по сравнению с использованием одного значения. Хотя единицы общая стойкость такие же, как те, которые используются для полураспада химического вещества (часов), эти два термина не являются Интер-кабриолет. Общая стойкость учитывает как химический СМИ-конкретные полураспада, а также скорость ее транспорта в (и из) этого отсека. Потому что общая стойкость учитывает транспорта, его стоимость скорее всего будет отличаться от любого СМИ-конкретные полураспада.</p> <p>Общая стойкость может быть определена только в масс-баланса мультимедийная модель. Эти модели расчета общего настойчивость, определяя средневзвешенное время нахождения в каждом отсеке.</p> <p>Общая стойкость бензола, 1,2-диметил - составляет 7,9 дней, используя сценарий выбросов по умолчанию из III мультимедийная модель. Общая стойкость используя различные сценарии выхода приводится в следующем разделе.</p>
Сценарии Выпуска	<p>Смета Профилировщик ПБТ сохраняемости на основе стандартного сценария выхода излучающих равных количествах в почве, воде и воздухе. Более углубленная оценка P2 могут использовать сценарий выхода, который более адекватно отражал жизненный цикл индивидуального химического вещества. Этот раздел Профилировщик ПБТ обеспечивает семь различных сценариев выхода, чтобы помочь определить возможности для P2 бензол, 1,2-диметил-. Семь сценариев выхода основываются на более реалистичных общем объеме выпуска 300 кг/час для окружающей среды и не 1000 кг/ч показана на странице ПБТ результаты Профайлера. Поскольку модель фугитивности является линейным, процентов в каждом отсеке не зависит от общего выпуска в окружающую среду, но только на относительное количество выбрасываемых в воздух, воду и почву.</p> <p>В следующей таблице приведены процентов каждого экологического отсека, используя различные сценарии освобождения. Бензол, 1,2-диметил-: носителя (вода, почва и отложения), химические как ожидается, будет найден в основном (основной отсек) подчеркивается. Цвет каждой сметы указывается, если критерии ЭПК были превышены в этой конкретной среде. Поэтому, определяя цвет подчеркивания значения в каждой строке, сохранение рейтинга для каждого сценария можно сравнить значение сохраняемости по умолчанию, П, подсчитали Профилировщик ПБТ.</p>

ТАКЖЕ ПО КАЖДОМУ ПАРАМЕТРУ ПРОГРАММА ВЫДАЕТ ПОДРОБНОЕ РЕЗЮМЕ ВЫБРАННОГО ВЕЩЕСТВА.



Релиз для каждой среды (кг/час)			Процентов в каждой среде				P ₀
Воздуха	Воды	Почвы	Воздуха	Воды	Почвы	СЭД	
100	100	100	11	33	55	1	7.9
150	0	150	14	0	86	1	7.6
300	0	0	99	0	1	1	1.2
150	150	0	18	80	0	1	4.9
0	150	150	6	35	58	1	11
0	300	0	6	92	0	1	8.5
0	0	300	6	0	93	1	14

Биоаккумуляция Реферат

Биоконцентрация Биоаккумуляция-это процесс, при котором концентрации химических веществ в водной организма достигает уровня, который превышает в воде, в результате химического поглощения через все возможные пути воздействия. Биомagnификация, относится к концентрации химических веществ до уровня, превышающего что в результате его диеты. Биоаккумуляции и биомagnификации включает себя как биоконцентрации.

В целом химические вещества, которые имеют потенциал к биоаккумуляции потенциал биоаккумуляции. Поскольку коэффициент биоконцентрации (КБК) в рыбе могут быть легко измерены в лаборатории и биоаккумуляции гораздо сложнее определить. РМДС часто используется, чтобы предсказать значение биоаккумуляции. Расчетная коэффициент биоконцентрации (КБК) бензола, 1,2-диметил-, 56, не превышает к биоконцентрации ЭПК критериям.

Биоаккумуляция Оценка

Смета Профилировщик ПБТ что бензол, 1,2-диметил - есть не ожидается биоаккумуляция в пищевой цепочке, поскольку не превышают критерии КБК.

Резюме Токсичность

Рыбы ПБТ химических веществ являются те, которые сохраняются в окружающей среде, биоконцентрации в водных организмах, и может биоаккумуляции в организме человека, птиц и диких млекопитающих.
Хронический Воздействие химических веществ ПБТ приведет к хроническому воздействию, которое, в свою очередь, приводит к хронической интоксикации. Профилировщик использует ПБТ оценкам, рыбы значение хронического отравления (Чв), чтобы позволить органических химических веществ, не хватает экспериментальных данных для проверки P2 возможности. Более углубленная оценка P2 требует, чтобы потенциальная токсичность бензола, 1,2-диметил - для других водных организмов (и на другие длительности воздействия) определяется.

Смета Профилировщик ПБТ что бензол, 1,2-диметил - есть хронически токсичен для рыб. Важно отметить, что бензол, 1,2-диметил - также могут быть токсичными для других водных организмов. Некоторые водные организмы, такие, как дафнии, могут быть более чувствительны к острой и хроническом воздействию бензола, 1,2-диметил-. Для оценки токсичности бензола, 1,2-диметил - для других водных организмов, ПБТ profiler предоставляет полный ECOSAR™ оценок для этой смеси, как описано ниже.

Другие Токсичность Информация

В отличие от стойкости и биоаккумуляции, существует широкий спектр различных водных токсичности, которые могут иметь значение при оценке химического для P2 возможностей Профилировщика ПБТ определяет рыба, хроническая токсичность для водной среды для его рейтинга токсичности. Конечные точки, специфичной для человека, птиц и наземных видов бентосных организмов и других водных животных, не включенных в ПБТ Профилировщик рейтинге токсикоза, который появляется на первой странице результатов. Другие конечные точки, связанные с острой, хронической суб и



СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ

