

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТРЛІГІ
МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН

ҚОСТАНАЙ МЕМЛЕКЕТТІК ПЕДАГОГИКАЛЫҚ ИНСТИТУТЫ
КОСТАНАЙСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

АЗИЯ ДАЛАЛАРЫНДАҒЫ БИОЛОГИЯЛЫҚ ӘРТҮРЛІЛІК

*III Халықаралық ғылыми конференцияның
(Қазақстан Республикасы, Қостанай қ., 2017 жылдың 24-27 сәуірі)*



БИОЛОГИЧЕСКОЕ РАЗНООБРАЗИЕ АЗИАТСКИХ СТЕПЕЙ

*Материалы III Международной научной конференции
(24-27 апреля 2017 г., Костанай, Казахстан)*

BIOLOGICAL DIVERSITY OF ASIAN STEPPE

*Proceedings of the III International Scientific Conference
(April 24-27, 2017, Kostanay, Kazakhstan)*

Костанай 2017

УДК 502/504
ББК 20.18
А 30

А 30 Азия далаларындағы биологиялық әртүрлілік III халықар. ғыл. конф. Материалдары (Қазақстан Республикасы, Қостанай қ., 2017 жылдың 24-27 сәуірі) / ғылыми редакторлары Е.А. Әбіл, Т.М. Брагина. - Қостанай: ҚМПИ, 2017. - 366 с..

Биологическое разнообразие азиатских степей: Материалы III междунар.научн. конф. (24-27 апреля 2017 г., г. Костанай, Казахстан) / под научн. редакцией Е.А. Абиль, Т.М. Брагиной. - Костанай: КГПИ, 2017. - 366 с.

Biological Diversity of Asian Steppe. Proceedings of the III International Scientific Conference (April 24-27, 2017, Kostanay, Kazakhstan) /science editors E.A. Abil, T.M. Bragina. – Kostanay: KSPI, 2017. – 366 pp.

ISBN 978-601-7839-73-4

**РЕДАКЦИЯ АЛҚАСЫ
РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ**

Жауапты редакторлары:

Әбіл Е.А., тарих ғылымдарының докторы, профессор
Брагина Т.М., биология ғылымдарының докторы, профессор
Ахметов Т.А., педагогика ғылымдарының кандидаты, профессор

Редакция алқасының мүшелері

Брагин Е.А., биология ғылымдарының кандидаты, профессор; *Божекенова Ж.Т.*, биология магистрі; *Ильяшенко М.А.*, биология магистрі; *Рулёва М.М.*, биология магистрі; *Сухов М.В.*, техникалық ғылымдарының кандидаты, доцент; *Суюндикова Ж.Т.*, биология ғылымдарының кандидаты, доцент

В сборнике опубликованы материалы III Международной научной конференции «Биологическое разнообразие азиатских степей». В докладах рассмотрены итоги исследований и перспективы сохранения биологического разнообразия степных экосистем, островных и ленточных лесов и водного-болотных угодий степной зоны Евразии, охраны природных территорий и популяций видов особого природоохранного значения, формирования экологической сети и вклада вузов в изучение биоразнообразия. Книга предназначена для ученых и практиков, работающих в области изучения и сохранения биологического разнообразия, преподавателей вузов, аспирантов, студентов, работников природоохранных учреждений.

УДК 502/504
ББК 20.18

*Рекомендовано к изданию Ученым советом
Костанайского государственного педагогического института МОН РК*

*За достоверность предоставленных в сборнике сведений и использованной
научной терминологии ответственность несут авторы статей*

ISBN 978-601-7839-73-4

© Костанайский государственный педагогический институт, 2017
© Научно-исследовательский центр проблем экологии и биологии, 2017

объектов) разбавляется водой в 5-10 раз по объему (инновационный патент РК № 28885 от 15.09.2014 г.). Этот состав наиболее надежен для хранения любых грибов, даже при значительном количестве биологического материала в ограниченном объеме фиксатора и обладает небольшим приятным запахом ацетала. Среды для хранения с использованием тосола и антифриза, имеющим в составе сахарозу и соль, кроме того, что являются консервантами, устраняют неприятные запахи в фекалиях животных и в патматериале (инновационный патент РК № 30082 от 15.07.2015 г) [3].

Составы предложенные ранее авторами и авторами данной статьи, зарекомендовали себя с положительной стороны как хорошие диагностические реактивы и как консерванты, обеспечивающее длительное хранение большого количества биоматериалов и патматериалов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1 Котельников Г.А. Гельминтологические исследования животных и окружающей среды: Справочник. – М.: Колос, 1983. – 208 с., ил.; с. 30.
- 2 Тарасовская Н.Е., Булекбаева Л.Т. Новые способы хранения биосубстратов для паразитологических исследований и методы диагностики паразитозов// Биологические науки Казахстана. – Павлодар, 2014. - № 4. – С.60-67.
- 3 Булекбаева Л.Т., Тарасовская Н.П. Среда для хранения копрологического материала для паразитологических исследований// Инновационный патент РК №30082. опубл. 15.07.2015 г., биол. № 7, кл. А 01N 1/00. – 3 с.
- 4 Генис Д.Е. Медицинская паразитология. Для учащихся медицинских училищ. Издание четвертое, переработанное и дополненное. – М.: Медицина, 1991. – С. 177

КОМПЬЮТЕРНОЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ПЕСТИЦИДНОЙ АКТИВНОСТИ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ РАЗЛИЧНЫХ КЛАССОВ

Computer prediction of the pesticidal activity of compounds of different classes

**Важев В.В.¹, Ергалиева Э.М.², Важева Н.В.², Губенко М.А.²,
Лалаян Н.Т.¹, Мунарбаева Б.Г.¹
Vazhev V.V.¹, Ergalieva E.M.², Vazheva N.V.², Gubenko M.A.²,
Lalayan N.T.¹, Munarbaeva B.G.¹**

¹*Костанайский социально-технический университет им. З. Алдамжар, г. Костанай,
Казахстан, e-mail: v.vazhev@gmail.com*

²*Костанайский государственный педагогический институт, Костанай, Казахстан,
e-mail: erg_el@mail.ru*

Использование пестицидов носит двойственный характер. С одной стороны, практически признана необходимость их применения в связи с продовольственной проблемой, которая с годами не теряет своей актуальности. Её суть заключается в несоответствии растущего спроса населения на продукты питания и возможностей сельскохозяйственного производства, ограниченного имеющимися земельными и водными ресурсами и уровнем развития самой отрасли. С другой стороны, из всех компонентов сельскохозяйственной интенсификации использование пестицидов, особенно инсектицидов и фунгицидов, оказывает наибольшее отрицательное действие на биологическое разнообразие. Это влияние связано как с прямым действием пестицидов (токсичность), так и с косвенным (изменения в среде обитания организмов и в цепи питания). Проблема применения пестицидов постоянно находится в поле зрения ученых. Так, в 2015 г. было

опубликовано в открытом доступе исследование, представленное как всемирная комплексная оценка воздействия системных пестицидов на биоразнообразие и экосистемы. На основе анализа 1121 опубликованных за последние пять лет исследований были сделаны выводы и рекомендации [2].

Для успешного применения пестицидов в сельском хозяйстве, в некоторых отраслях промышленности и в системе здравоохранения наряду с высокой физиологической активностью их по отношению к различным вредным организмам необходимо, чтобы они обладали комплексом свойств, обеспечивающих не только эффективность их действия, но и безопасность использования. Одно из важнейших санитарно-гигиенических требований к препаратам – возможно более низкая острая и особенно хроническая токсичность их для теплокровных животных. Обязательным условием безопасного применения пестицидов является отсутствие у них бластомогенного, тератогенного, мутагенного, гонадотропного, эмбриотоксического действия и других возможных отдаленных последствий [9].

Определение токсичности пестицидов экспериментальным путем требует весьма значительных финансовых и временных затрат, часто связано с техническими и технологическими трудностями и т.д. Поэтому актуальным является создание надежных и достоверных вычислительных методов оценки токсичности химических соединений. Все большее значение приобретают методы определения токсичности веществ путем расчетов. Наиболее перспективным из них считается QSAR/QSTR - метод, устанавливающий корреляционные соотношения структура-активность и структура-токсичность.

Проблема прогнозирования токсичности пестицидных соединений с использованием методов QSAR является предметом исследования многих ученых [1, 3-7].

В нашей работе в качестве объектов прогнозирования была выбрана токсичность пестицидных соединений различных классов для пчел (*Apis mellifera*). Показатели токсичности $-\lg(LD_{50})$ для пчел получены в работе [1]. Для построения модели применяли компьютерную программу PROGROC, разработанную В.В. Важевым и описанную в работе [8]. Дескрипторы рассчитаны в программе Dragon [10]. Качество прогнозирования характеризовали коэффициентом корреляции R между прогнозируемыми и экспериментальными значениями параметра токсичности и стандартным отклонением s. Тренировочная выборка состояла из 73, а контрольная - из 30 веществ.

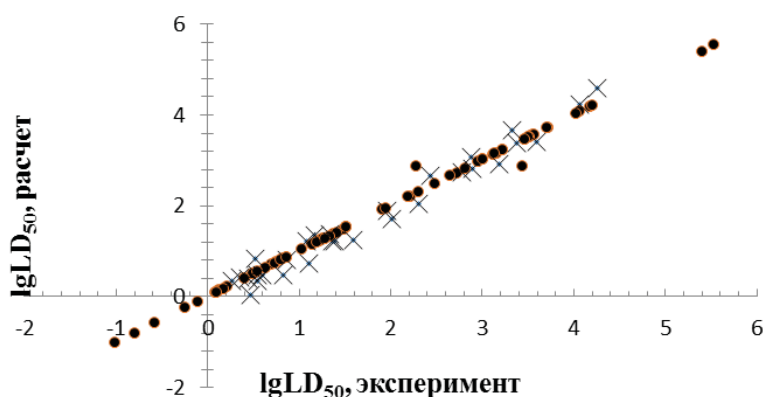


Рисунок 1 Корреляция между экспериментальными и вычисленными значениями $-\lg(LD_{50})$ по молекулярным дескрипторам для пчел (*Apis mellifera*)

● – тренировочная выборка; × - контрольная выборка

Результаты прогнозирования приведены на рисунке 1. Количественные показатели соответствующих корреляционных зависимостей приведены в таблице 1.

Таблица 1 - Показатели корреляции между экспериментальными и вычисленными значениями $-\lg(LD_{50})$ для пчел (*Apis mellifera*)

Показатели корреляции	Весь набор	Тренировочная Выборка	Контрольная выборка
R	0.97	0.99	0.98
S	0.15	0.09	0.21

С использованием полученных данных были исследованы 278 соединений, проявляющих пестицидную активность для форели, дафний и перепела.

Согласно прогнозу, наибольшую токсичность по отношению к пчелам будут проявлять 12 из исследованных соединений. Данные соединения можно отнести к потенциально опасным токсикантам, концентрация которых в $1 \cdot 10^{-4}$ ммоль/л вызывает гибель половины особей. Потенциально наиболее опасными токсикантами являются Chlordecone, Mirex и Fenitrothion.

Была исследована возможность использования молекулярных дескрипторов для прогнозирования токсичности для перепела (*Coturnix Linnaeus*) набора из 122 веществ, включающего соединения разных классов. Показатели токсичности LD_{50} для перепелов получены [1]. Тренировочная выборка состояла из 72, а контрольная - из 50 веществ. Результаты прогнозирования приведены на рисунке 2.

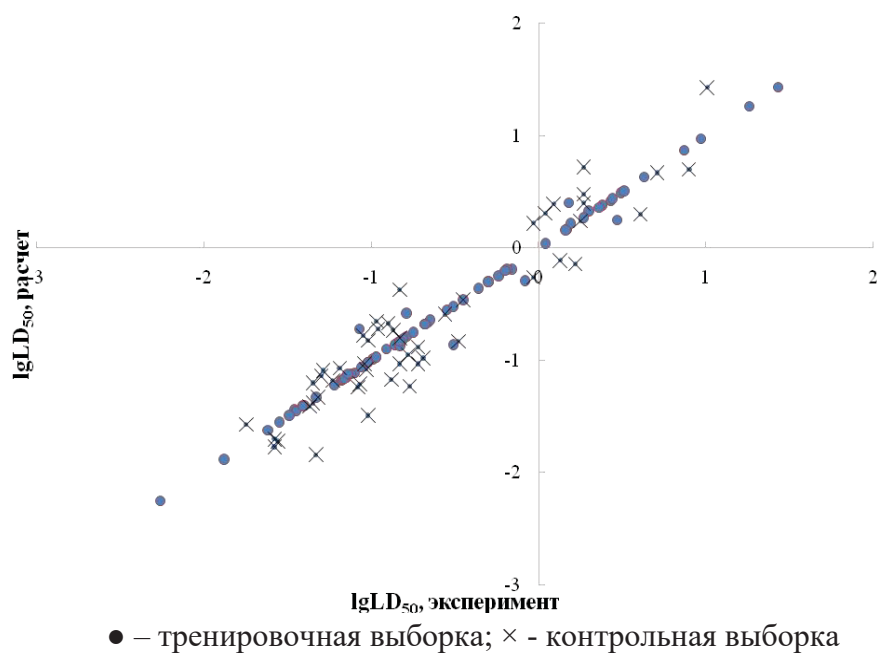


Рисунок 2 - Корреляция между экспериментальными и вычисленными значениями $-\lg(LD_{50})$ по дескрипторам для перепела (*Coturnix Linnaeus*)

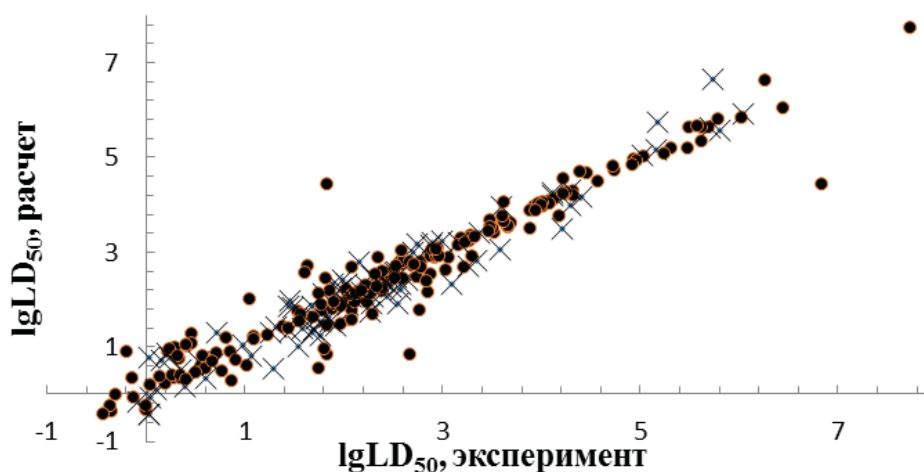
Количественные показатели соответствующих корреляционных зависимостей приведены в таблице 2.

Таблица 2 - Показатели корреляции между экспериментальными и вычисленными значениями $-\lg(LD_{50})$ для перепела (*Coturnix Linnaeus*)

Показатели корреляции	Весь набор	Тренировочная Выборка	Контрольная выборка
R	0.97	0.99	0.94
S	0.16	0.07	0.25

С использованием полученной модели QSAR были исследованы 260 соединений, проявляющих пестицидную активность для других видов. Анализ результатов прогнозирования показал, что изученные 260 соединений являются средне- и слаботоксичными по отношению к перепелу.

Исследована возможность использования молекулярных дескрипторов для прогнозирования токсичности пестицидов набора из 281 вещества, включающего соединения разных классов. Тренировочная выборка состояла из 191, а контрольная - из 90 веществ. Результаты прогнозирования $-\lg(LD_{50})$ при этом ранге приведены на рисунке 3.



● – тренировочная выборка; × - контрольная выборка

Рисунок 3 - Корреляция между экспериментальными и вычисленными значениями $\lg(LD_{50})$ для форели по молекулярным дескрипторам

Количественные показатели соответствующих корреляционных зависимостей приведены в таблице 3.

Таблица 3 - Показатели корреляции между экспериментальными и вычисленными значениями $\lg(LD_{50})$ для форели по дескрипторам

Показатели корреляции	Весь набор	Тренировочная Выборка	Контрольная выборка
R	0.97	0.96	0.97
S	0.39	0.42	0.36

С использованием полученной модели QSAR было исследовано 101 соединение, проявляющее пестицидную активность для других видов. Согласно прогнозу, наибольшую токсичность по отношению к форели будут проявлять Permethrin, Mirex, Bromethalin, Tetramethrin, Triticonazole и Flucythrinate. Молекулы данных соединений содержат

некоторые похожие фрагменты, что позволяет предположить, что данные структуры (например, циклические группировки, наличие галогенов в функциональных группах) оказывают влияние на токсичность соединений.

На основе полученных данных нами были исследована возможность прогнозирования пестицидной активности соединений, сведения о токсичности которых в отношении выбранных нами объектов не найдены. Закономерно, что соединения, токсичные для пчел и форели, обладают низкими значениями $-\lg(LD_{50})$ по отношению к перепелу. Наибольшей токсичностью обладают молекулы, содержащие несколько таксофорных групп, к примеру, полициклические структуры Triticonazole, Bromadiolone, Captafol, Pyridate, ТСМТВ, Fluchloralin, содержащие в циклах гетероатомы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

- 1 Benfenati E. et al. Quantitative Structure-Activity Relationships (QSAR) for Pesticide Regulatory Purposes; Hybrid systems. Publisher: Elsevier, 2007. - P. 149-183.
- 2 Bijleveld van Lexmond M., Bonmatin J.M., Goulson D., Noome D.A. (2015) Worldwide integrated assessment on systemic pesticides. Global collapse of the entomofauna: exploring the role of systemic insecticides / Environmental Sci. Pollut. Res. 22:1-4. doi: 10.1007/s11356-014-3220-1.
- 3 Devillers J., Pham-Delègue M.H., Decourtye A., Budzinski H. et al. Structure-toxicity modeling of pesticides to honey bees. // SAR QSAR Environ Res. 2002. - 13(7-8). - P. 641-648.
- 4 He G., Feng L., Chen H.A. QSAR Study of the Acute Toxicity of Halogenated Phenols. // Procedia Engineering. -2012. - № 43. - P.204 – 209.
- 5 Hussein M. A., El-Sayed W., A.R.G. Tomader Synthesis, Pesticidal Activity And Quantitative Structure-Activity Relationships of A series of N-(2-oxido-1,3,2-benzodioxaphosphol-2-yl) // Amino Acid Ethyl or Diethyl Esters Australian Journal of Basic and Applied Sciences.- 2007.-№1(4).- P. 593-599.
- 6 Slavov S., Gini G., Benfenati E. QSAR trout toxicity models on aromatic pesticides. // Journal of Environmental Science and Health. Part B.- 2008.- № 43.- P. 633–637.
- 7 Toropov A.A., Benfenati E. QSAR models for Daphnia toxicity of pesticides based on combinations of topological parameters of molecular structures.// Bioorganic and Medicinal Chemistry.- 2006. -№ 14(8).- P. 2779-2788.
- 8 Важев В. В. Использование ИК- и масс- спектров в QSAR/QSPR –исследованиях. Костанай: Изд-во КГУ, 2003. - 114 с.
- 9 Мельников Н.Н. Пестициды. Химия, технология и применение. - М.: Химия, 1987. - 712 с.
- 10 Сайт «Molecular descriptor, QSAR, chemometrics and chemoinformatics – Taletesrl». – Режим доступа: <http://www.talete.mi.it/>

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОСТРОЙ ВОДНОЙ ТОКСИЧНОСТИ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ ДЛЯ *PIMEPHALES PROMELAS*

Modeling of acute aquatic toxicity of organic compounds for Pimephales promelas

Важев В.В.¹, Ергалиева Э.М.², Важева Н.В.², Губенко М.А.², Лалаян Н.Т.¹,
Мунарбаева Б.Г.¹
Vazhev V.V.¹, Ergalieva E.M.², Vazheva N.V.², Gubenko M.A.², Lalayan N.T.¹,
Munarbaeva B.G.¹

¹Костанайский социально-технический университет им. З. Алдамжар, г. Костанай
²Костанайский государственный педагогический институт, г. Костанай, Казахстан

Изучение количественных соотношений структура-активность (QSAR) в настоящее время приобрело огромное значение в области науки об окружающей среде. QSAR может быть полезным в сокращении времени и стоимости токсикологических экспериментов, для

- Шупова Т.В., Чаплыгина А.Б.** 264
Трансформация орнитофауны байрачного леса заказника общегосударственного значения «Лучковский» (Украина)
The transformations of avifauna of the forest in the reserve of national importance "Luchkivskiy"(Ukraine)

**ЖОҒАРҒЫ ОҚУ ОРЫНДАРЫНДАҒЫ АЙМАҚТЫҚ БИОАЛУАНТҮРЛІЛІГІ
БОЙЫНША ҒЫЛЫМИ-ЗЕРТТЕУ ЖҰМЫСТАРЫНЫҢ НӘТИЖЕЛЕРІ**

**РЕЗУЛЬТАТЫ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ РАБОТ ВУЗОВ
В ИЗУЧЕНИИ РЕГИОНАЛЬНОГО БИОРАЗНООБРАЗИЯ**

**RESULTS OF SCIENTIFIC RESEARCH WORK OF HIGHER EDUCATIONAL
INSTITUTIONS IN THE STUDY OF REGIONAL BIODIVERSITY**

- Абдыкаликова К. А., Нурушева А.Б.** 271
Фитохимический анализ некоторых лекарственных растений Костанайской области
Phytochemical analysis of some medicinal plants of Kostanay region
- Арыстанова С.А., Хамитова К.К., Нүркенова Ә.Д.** 274
Богатство живой природы Казахстана
Richness of wildlife of Kazakhstan
- Баубекова Г.К., Баймаганбетова К.Т., Жусупова А.У.** 279
Географический анализ сельскохозяйственных земель Костанайской области
Geographical analysis of agricultural land Kostanay
- Булекбаева Л.Т., Тарасовская Н.Е.** 282
Диагностика, хранение и консервирование биологического материала инновационными методами
Diagnostics, storage and preservation of biological material innovative methods
- Важев В.В., Ергалиева Э.М., Важева Н.В., Губенко М.А., Лалаян Н.Т., Мунарбаева Б.Г.** 287
Компьютерное прогнозирование пестицидной активности химических соединений различных классов
Computer prediction of the pesticidal activity of compounds of different classes
- Важев В.В., Ергалиева Э.М., Важева Н.В., Губенко М.А., Лалаян Н.Т., Мунарбаева Б.Г.** 291
Моделирование острой водной токсичности органических соединений для *Pimephales promelas*
Modeling of acute aquatic toxicity of organic compounds for Pimephales promelas
- Важев В.В., Ергалиева Э.М., Важева Н.В., Губенко М.А., Нурушева А.Б.** 295
Количественная оценка токсичности пестицидов по отношению к *Daphnia magna* с использованием ик- и масс-спектров
Quantitative estimation of the toxicity of pesticides in relation to Daphnia magna using IR and mass spectra
- Важева Н.В., Ергалиева Э.М., Важев В.В., Губенко М.А., Тукманов Ж.Т.** 299
Экспериментальное изучение окислительно-восстановительных ферментов растений как средство экологической подготовки химиков
Experimental study redox enzymes plants as a tool for environmental training chemists