

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

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*

Важев В.В.¹, Ергалиева Э.М.², Важева Н.В.², Губенко М.А.², Нурушева А.Б.²
Vazhev V.V.¹, Ergalieva E.M.², Vazheva N.V.², Gubenko M.A.², Nurusheva A.B.²

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

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

QSAR (Quantitative Structure Activity Relationships – Количественные Соотношения между Структурой и Активностью, в русскоязычной литературе также используется аббревиатура КССА) – это математический аппарат, позволяющий проводить корреляции между структурами химических соединений и их биологической активностью. Важная задача QSAR заключается в идентификации и количественном выражении структурных параметров или физико-химических свойств молекул с целью выявления факта влияния каждого из них на биологическую активность. Если такое влияние имеет место, то возможно составление уравнений, позволяющих прогнозировать активность соединений. Настоящая работа посвящена исследованию возможности прогнозирования параметров неблагоприятных биологических эффектов пестицидов и ароматических и гетероциклических аминов с использованием ИК- и масс-спектров в качестве дескрипторов молекулярных структур.

Для получения рабочих значений дескрипторов масс-спектры перед расчетами были преобразованы по формуле

$$d_{ij} = \frac{h_{ij}}{\sum_{k=1}^{k=n} h_{ik}},$$

где d_{ij} - рабочие значения дескрипторов, используемые в расчетах; n- количество пиков; h_{ij} - их относительные интенсивности; i – номер вещества; j - номер пика с соответствующим m/z - отношением массы к заряду k-го иона в молекуле с номером i. Элементы формируют матрицу дескрипторов. Расчеты выполнены с помощью компьютерной программы PROGROC (PROGgram ROBustness Calculation) [3]. Качество прогнозирования характеризовали коэффициентом корреляции R между прогнозируемыми и экспериментальными значениями параметра токсичности и стандартным отклонением s.

Исследована возможность использования масс-спектров для прогнозирования токсичности пестицидов по отношению к *Daphnia magna* набора из 185 веществ, включающего соединения разных классов. Токсичность веществ по отношению к *Daphnia magna* часто выражают в единицах lg(LC₅₀), где LC₅₀- концентрация вещества в ммоль/л, вызывающая гибель половины особей популяции. Использованы масс-спектры веществ, имеющиеся на сервере NIST (США) [2]. Тренировочная выборка состояла из 140, а контрольная - из 45 веществ. Результаты прогнозирования lg(LD₅₀) при этом ранге приведены на рисунке 1.

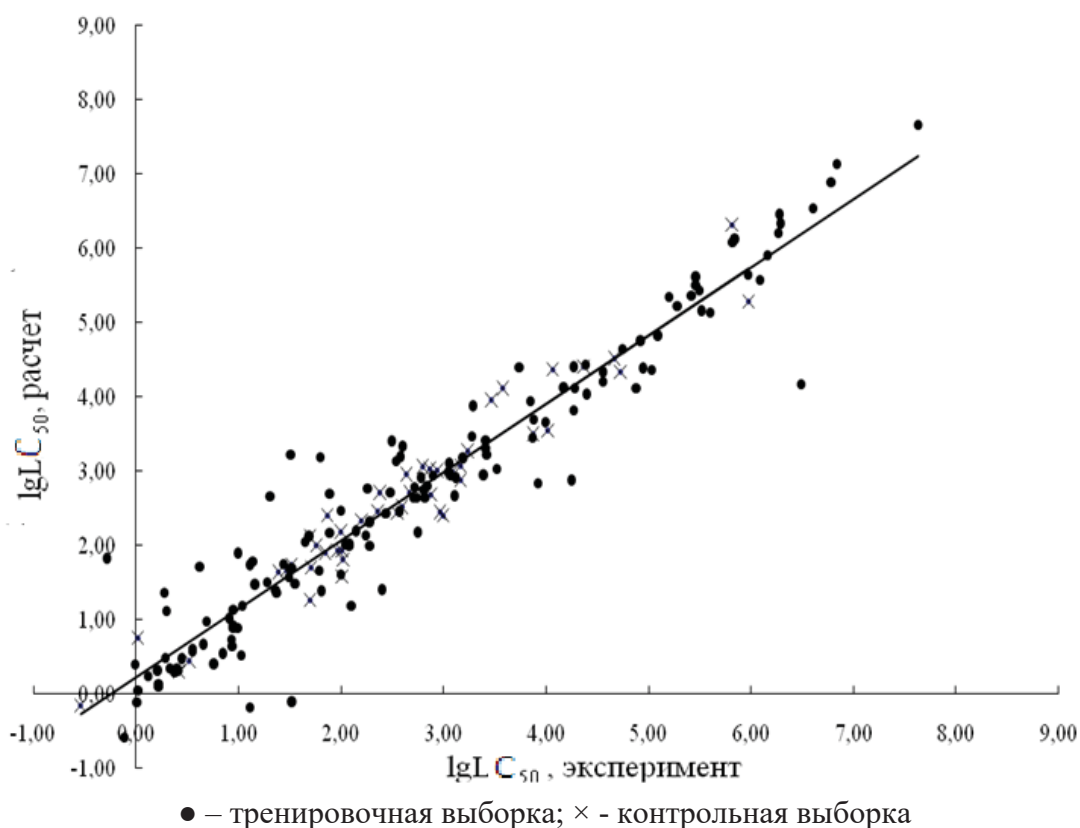


Рисунок 1 - Корреляция между экспериментальными и вычисленными значениями $\lg(\text{LC}_{50})$ для *Daphnia magna* по масс-спектрам

Количественные показатели соответствующих корреляционных зависимостей приведены в таблице 1.

Таблица 1 - Показатели корреляции между экспериментальными и вычисленными значениями $\lg(\text{LC}_{50})$ для *Daphnia magna* по масс-спектрам

Показатели корреляции	Весь набор	Тренировочная выборка	Контрольная выборка
R	0.9600	0.9586	0.9691
s	0.48	0.52	0.31

Было выполнено прогнозирование $\lg(\text{LC}_{50})$ для дафнии с контролем по спарринг-партнеру – молекулярной массе. Результаты, приведенные на рисунке 2, характеризуются коэффициентом корреляции $R = 0.96$ и стандартным отклонением $s = 0.48$.

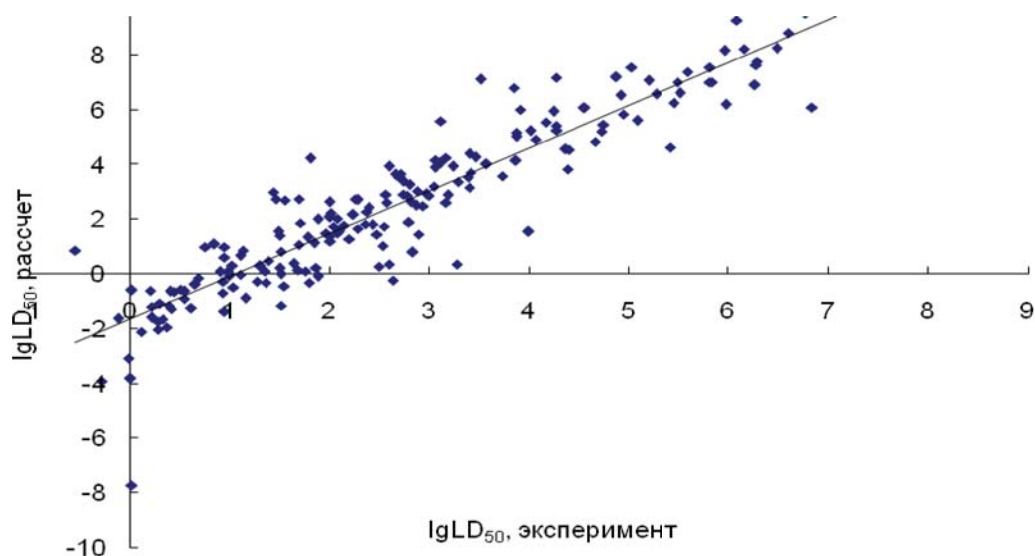


Рисунок 2 - Корреляция между экспериментальными и вычисленными значениями $\lg(LC_{50})$ при скользящем контроле по масс-спектрам для *Daphnia magna*

Была исследована также возможность использования ИК-спектров для прогнозирования токсичности пестицидов набора из веществ, включающего соединения разных классов. Использованы ИК-спектры веществ, имеющиеся на сервере NIST (США) [2]. Прогнозирование выполнено с помощью компьютерной программы PROGROC [3]. Тренировочная выборка состояла из 63, а контрольная – из 20 веществ. Результаты прогнозирования $\lg(LC_{50})$ при этом ранге приведены на рисунке 3.

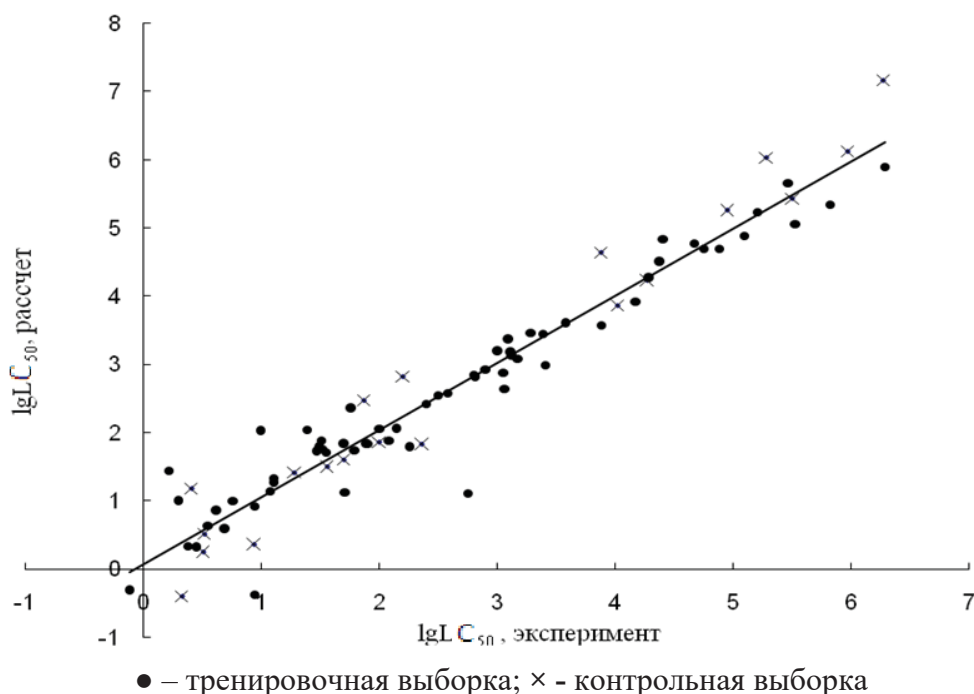


Рисунок 3 - Корреляция между экспериментальными и вычисленными значениями $\lg(LC_{50})$ по ИК-спектрам для *Daphnia magna*

Количественные показатели соответствующих корреляционных зависимостей приведены в таблице 2.

Таблица 2 - Показатели корреляции между экспериментальными и вычисленными значениями $\lg(LC_{50})$ для *Daphnia magna* по ИК-спектрам

Показатели корреляции	Весь набор	Тренировочная Выборка	Контрольная выборка
R	0.9670	0.9632	0.9809
s	0.44	0.41	0.45

Значения коэффициента корреляции R свидетельствуют о высоком качестве построенной нами модели прогнозирования.

Было выполнено прогнозирование $\lg(LC_{50})$ для *Daphnia magna* с контролем по спарринг-партнеру – молекулярной массе. Результаты, приведенные на рисунке 4, характеризуются коэффициентом корреляции $R = 0.9670$ и стандартным отклонением $s = 0.44$.

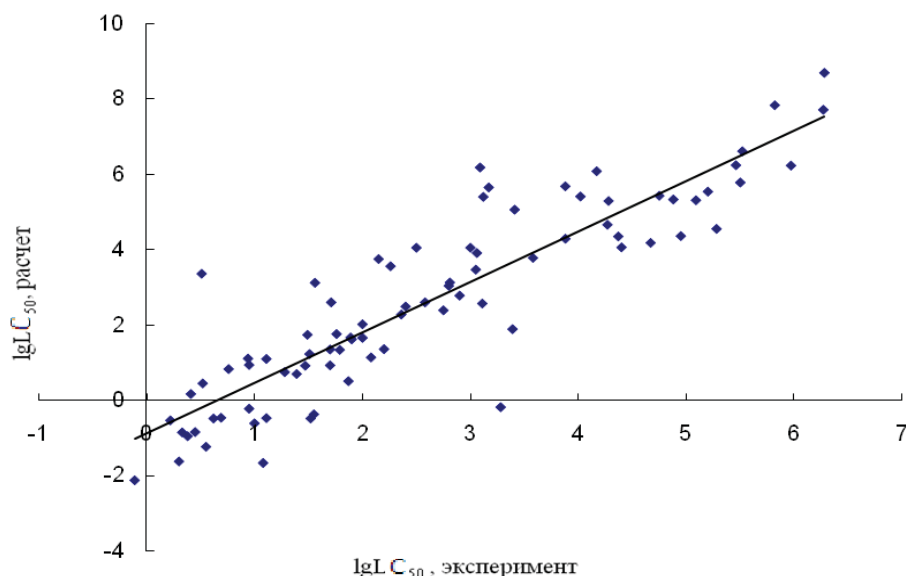


Рисунок 4 - Корреляция между экспериментальными и вычисленными значениями $\lg(LC_{50})$ при скользящем контроле по ИК- спектрам для *Daphnia magna*

Данные прогнозирования, полученные с использованием ИК- и масс-спектров в качестве дескрипторов, позволяют сделать вывод о возможности использования спектров в качестве описателей структуры вещества. Использование ИК- и масс-спектров в качестве дескрипторов для прогнозирования биологической активности позволяет получить точные и достоверные результаты, а также более высокие показатели корреляции по сравнению с другими авторами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1 Benfenati E. Quantitative Structure-Activity Relationships (QSAR) for Pesticide Regulatory Purposes. // Milano: Istituto di Ricerche Farmacologiche “Mario Negri”. - 2007. - 510 p.
- 2 NIST Chemistry WebBook. NIST Standard Reference Database Number 69 - November 1998 Release. <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
- 3 Важев В. В. Использование ИК- и масс- спектров в QSAR/QSPR –исследованиях. Костанай: Изд-во КГУ, 2003. - 114 с.

- 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

Горбуля В.С., Курин А.А., Кооп О.В.	302
Фитофаги яровой пшеницы в условиях Аршалынского района Акмолинской области <i>Phytophages of spring wheat in conditions of Arshalynsky district of the Akmola region</i>	
Жумагалиева М.Б., Ардакова А.Э.	307
Екі түрлі физика-химиялық әдістің адекваттығын зерттеу <i>Definition of adequacy of two different physical and chemical methods</i>	
Коньсбаева Д. Т., Зимницкая С. А., Жакупов А. Ж.	312
Изучение флоры отвалов техногенных ландшафтов на примере Соколовского рудника <i>Studying of flora of dumps of technogenic landscapes on the example of Sokolovsky of the mine</i>	
Коптев А. И.	317
Анализ фауны отрядов насекомых окрестностей п. Железнодорожное, Карасуского района, Костанайской области <i>Analysis the insects' fauna surrounding Zheleznodorozhniy village, Karasu district, Kostanay region</i>	
Нурушев М.Ж., Жагпарова Д. Р., Тахрадинова С.Ш., Журманова Н.Ш., Азмудинов Е.С., Камалов О.	323
Роль селекции в сохранении биоразнообразия рода (<i>Equus</i>) <i>Selection role in preservation of the biodiversity of the Sort (Equus)</i>	
Омарова К.И., Коваль В.В., Дмитрийчук В.В.	328
Использование земель Денисовского района Костанайской области в сельском хозяйстве <i>The using of agricultural lands in the Denisov district of the Kostanay region</i>	
Суюндикова Ж.Т., Зарлықанова Ә.Т.	333
Қостанай мемлекеттік педагогикалық институты студенттерінің биологиялық жасын бағалау <i>Estimation of biological age of students of the Kostanay State Pedagogical Institute</i>	
Таурбаева Г.У.	337
Ара балының сапасын зерттеу <i>The study of the quality of bee honey</i>	
Уразымбетова Б.Б., Ахметчина Т.А., Орманбекова Д.О.	343
Құсмұрын көлі мен оның ластануы <i>Kushmurun lake and its pollution</i>	