

УДК 632.951

**ОБРАБОТКА ПАТЕНТНОЙ ИНФОРМАЦИИ  
ПЕСТИЦИДНОАКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ С ИНСЕКТИЦИДНЫМ  
ВИДОМ АКТИВНОСТИ**

**Александр Васильевич Шуваев**

кандидат химических наук, доцент

[shuvaev53@mail.ru](mailto:shuvaev53@mail.ru)

ФГБОУ ВО Сибирский государственный университет путей сообщения,  
г. Новосибирск, Россия

**Аннотация.** Прделан анализ патентных данных, содержащих информацию о пестицидноактивных химических соединениях с инсектицидным видом активности. Разработаны наиболее типичные форматы, с помощью которых произведена обработка результатов биологических тест-испытаний с последующим вводом информации в базу данных.

**Ключевые слова:** биоактивные соединения, химическая структура, обработка патентной биологической информации, база данных, генерация биологической информации.

В ряде предыдущих работ [1 – 6] рассматривались вопросы построения компьютерной базы данных биологически активных химических соединений. Практическая реализация задачи сводится к первоначальной предварительной обработке исходных патентных данных и последующей записи информации в виде нескольких блоков-файлов на магнитные накопители. В файле "Patent" отображаются исходные данные титульных листов патентов. Химическая структурная информация целиком занимает файлы "Atom", "Radical", "Formula", "Replace" [3, 4], а физико-химическая и биологическая информация сосредоточена в файлах "Format" и "Value" [1, 2, 5, 6]. Таким образом достигается запись наиболее важной части информации патентов в концентрированном и компактном виде. Причем, что очень важно, обработка отдельных составляющих производится независимо. Наиболее детально нами была проработана химическая часть проблемы. Технологические основы построения базы данных структурной химической информации, предварительная обработка патентной химической структурной информации подробно изложены в работах [3, 4]. Вторая, не менее важная составляющая – биологическая информация, обрабатывается и заносится в базу данных путем формирования двух файлов: "Format" – заготовка определенных позиций с обозначением их наименований и "Value" – результаты биологического воздействия изучаемых химических соединений на определенные тест-организмы. Как показал опыт, попытки создать единый общий формат, охватывающий различные виды биологической активности, приводят, во-первых, к его сложному, громоздкому виду и, во-вторых, большие трудности возникают на стадии его непосредственного использования. Поэтому было принято решение производить обработку биологической информации отдельно по классам пестицидов: гербициды, фунгициды, регуляторы роста растений, инсектициды и др., и внутри каждого класса стремиться по мере возможности создавать наиболее общие форматы, удобные для обработки и занесения информации.

В работах [1, 2, 5, 6] были изложены результаты обработки данных о химических соединениях с гербицидным, фунгицидным и росторегулируемым видом активности. В данной работе мы продолжаем исследования на примере

соединений с инсектицидным видом активности.

*Процедура обработки биологической информации. Файл "Format"*

Предварительную обработку биологической информации необходимо начинать с построения формата, в структуре которого должны содержаться две составные части: базовая и дополнительная. Дополнительная часть предназначена для представления информации общего характера, в которой обычно указывается: номер формата (цифра); номер магнитной ленты или часть жесткого диска (ML) – условный номер одного или нескольких совместно обрабатываемых патентов; структурный интервал для отдельного патента (structure interval); химический класс соединений (chemical class); единицы биологической активности (numerical scale).

Базовая часть формата состоит из позиций, предназначенных для размещения всей совокупности данных физико-химических свойств исследуемых химических соединений и экспериментальных результатов их биологического действия в определенных условиях. В этой части содержится информация в следующем виде: структурный номер испытуемого соединения (structure number); температура плавления твердых веществ ( $^{\circ}\text{C}$ ) (m.p.(grad C)); для жидких индивидуальных соединений – температура кипения при определенном значении давления (в.р. (grad C)/P(torr)), показатель преломления при определенной температуре ( $n_D$ /(grad C)), спектральные характеристики (IR (1/SM)); доза (Rate (KG/HA)); концентрация (concentration (ppm, %)); наименование насекомого (insect); период после обработки (time after sprayed (days)); температура (temperature); оценка действия (mortality (%)).

Ниже приведены некоторые форматы, разработанные при обработке данных работ [7 – 11], наиболее типичные для биологических исследований соединений с инсектицидным видом активности. Всего таких форматов в базе данных насчитывается около 15, в файле "Format" они записаны под следующими номерами: 6, 10–17, 30, 32, 33, 38, 48–50.

\*Format:

6 & ML = & structure interval = & chemical class = & test = & application mode = & insect  
= & time after sprayed (days) = & mortality (%) = & structure number = & concentration (%) = \*

10 & ML = & structure interval = & chemical class = & test = & application mode = &

insect = & time after sprayed (days) = & structure number = & n<sub>D</sub>/(grad C) = & m.p. (grad C) = & concentration (%) = \*

11 & ML = & structure interval = & chemical class = & test = & application mode = & insect = & time of holding (hours) = & temperature = & structure number = & concentration (ppm) = & mortality (%) = \*

12 & ML = & structure interval = & chemical class = & test = & application mode = & insect = & structure number = & n<sub>D</sub>/(grad C) = & concentration (ppm) = time (hr) = & mortality (%) = \*

32 & ML = & structure interval = & chemical class = & test = & application mode = & insect = & structure number = & m.p. (grad C) = & concentration (mg/larvs) = & mortality (%) = \*

### *Файл "Value"*

Технологические особенности формирования файла "Value" подробно изложены в работе [2]. В этом файле происходит накопление экспериментального массива патентных данных о биологических испытаниях различных химических соединений. Размещение информации происходит строго упорядоченно в соответствии с позициями формата. Причем, дополнительная часть формата, в которой отражаются общие характеристики отдельного патента, обычно имеет постоянный вид для определенного структурного интервала и ее заполнение производится однократно.

Базовая часть формата, наоборот, имеет переменный вид, в ней размещается комплекс физико-химических и биологических характеристик исследуемых соединений на определенных биологических объектах. Если при заполнении данными одного формата ряд позиций окажутся пустыми (при отсутствии результатов) или, наоборот, в определенном месте необходимо расширить число позиций (при наличии более одного результата исследований при определенных условиях для одного и того же химического соединения), то в этих случаях возможно перемещение в прямом направлении с помощью операции: # + n, где n – натуральное число, показывающее сколько позиций в формате пропускается при перемещении вправо, так и в обратном – операция: # - m, перенос осуществляется влево на (m-1) позицию.

Различные химические соединения органического типа, чаще всего это фосфорорганические соединения, анализируются различными экспериментаторами в качестве инсектицидных средств борьбы с насекомыми и клещами. В большинстве

работ методика испытания сводится к следующему: готовят раствор, содержащий тестируемое химическое соединение, эмульгатор, растворитель (ацетон, спирт, вода). Далее разбавляют концентрат водой до желаемой концентрации и препаратом опрыскивают растение, добавляют насекомых и через определенное время определяют процент погибших насекомых. За 100 % принимают полное уничтожение насекомых, а 0 % – все насекомые остались живыми. В некоторых работах готовят маслянистую эмульсию, например, на основе дезодорированного керосина и испытуемого соединения, препаратом непосредственно опрыскивают насекомых. В качестве растений обычно используют: капусту, бобовые растения, рис, хлопок, чайное растение, картофель, репу, турнепс, табак, пшеницу, свеклу, горох, ячмень, кукурузу, огурцы, томаты, цветы, корневую систему растений и др.; насекомые: личинки *spodoptera littoralis*, *drosophila melanogaster*, *tenebrio molitor*, *aedes aegypt*, *sitophilus granarius*, *chilo suppressalis*, *tetranychus urticae*, *tetranychus cinnabarius*, *heliethis virescens*, *plutella maculipennis*, *phaedon cochleariae*, *pieris brassicae*, *dysercus fasciatus*, *aedes aegypti*, *ephestia kühniella*, *species liptinotarsa*, *decemlineata*; гусеницы капустной моли, совки; личинки листоеда хренового, мух, москитов, больших белых бабочек; клещи паутинный, быков; табачная тля, жуки дрозифилы, горничные, колорадский; комары, мухи, тараканы, персиковая тля, мучной хрущак имаго, кожеед имаго, меховой пятнистый кожеед, домашний сверчок, амбарный долгоносик, пухоеды, вши, блохи и др.

Для примера ниже показан фрагмент файла "Value" для соединений с инсектицидным видом активности, использованы данные работ [7 – 11].

\*Value:

3-6 & 220-265 & Acylformamidine & insecticidal activity & Kidney bean leaves are dipped in acetone-water solution of test chemical. After drying egg masses of insects were placed & salt-marsh caterpillar & 7 & 50 & 221 & 0.03 & # -2 & 222 & 0.01 & # -2 & 223 & 0.005 & # -2 & 224 & 0.003 & # -2 & 225 & 0.01 & # -2 & 226 & 0.05 & # -2 & 227 & 0.001 & # -2 & 228 & 0.05 & # -2 & 229 & 0.003 & # -2 & 230 & 0.001 & # -2 & 231 & > 0.05 & # -2 & 232 & 0.003 & # -2 & 233 & 0.003 & # -2 & 234 & 0.0008 & # -2 & 235 & 0.05 & # -2 & 236 & 0.003 & # -2 & 237 & 0.003 & # -2 & 238 & 0.05 & # -2 & 239 & 0.003 & # -2 & 240 & 0.001 & # -2 & 241 & > 0.05 & # -2 & 242 & > 0.05 & # -2 & 243 & 0.003 & # -2 & 244 & 0.005 & # -2 & 245 & > 0.05 & # -2 & 246 &

0.03 & # -2 & 247 & 0.003 & # -2 & 248 & 0.05 & # -2 & 249 & 0.005 & # -2 & 250 & > 0.05...

3-10 & 284-312 & phosphoroimidophenyl & insecticidal activity & nasturtium plants were transplanted into sandy loam soil and infested with 25-50 black bean aphids. 24 hours later they were sprayed. Treated plants were held in the greenhouse and mortality was recorded & black bean aphid-direct spray & 7 & 285 & 1.5644 && 0.001 & # -4 & 286 & 1.5575 && 0.003 & # -4 & 287 & 1.5245 && 0.0003 & # -4 & 288 & 1.5300 && 0.03 & # -4 & 289 & 1.5333 && 0.001 & # -4 & 290 && 143 & 0.03 & # -4 & 291 & 1.5840 && 0.03 & # -4 & 292 & 1.5710 && 0.008 & # -4 & 293 && 111 & 0.01 & # -4 & 294 && 109 & 0.008 & # -4 & 295 & 1.5655 && 0.003 & # -4 & 296 & 1.5421 && 0.003 & # -4 & 297 & 1.4840 && 0.003 & # -4 & 298 & 1.5370 && 0.003 & # -4 & 299 & 1.5700 && 0.05 & # -4 & 300 & 1.5845 && 0.001...

3-11 & 313-333 & Alkylphosphonodithioate & insecticidal activity & Lima bean leaves were dipped into the solution of test compound and then dried out of solution of the leaf. Five third instar larvae of southern armyworm were added to the leaf and after time percent of killing was recorded & southern armyworm & 72 & 72°F & 313 & 100 & 100 & # -3 & 315 & 100 & 100 & # -3 & 316 & 100 & 65 & # -3 & 318 & 90 & 75 & # -3 & 319 & 90 & 0 & # -3 & 320 & 90 & 40 & # -3 & 326 & 100 & 95 & # -3 & 327 & 100 & 85 & # -3 & 328 & 100 & 100 & # -3 & 329 & 100 & 100 & # -3 & 330 & 100 & 95 & # -3 & 331 & 100 & 25 & # -3 & 100 & 90 & ...

3-12 & 399-435 & phenylcyclo-propane carboxylic acid derivatives & insecticides & ten of carmine mites were inoculated on cutting leaf-dises of kidney bean (diameter 1,5 cm). Half day after solution of test compounds with definite concentration were sprayed. Number of mortalities were measured after 24 hr and 48 hr and percent were calculated & Carmine mine & 401 & 1.5595/20 & 300 & 24 & 100 & # -2 & 48 & 100 & # -3 & 90 & 24 & 100 & # -2 & 48 & 100 & # -3 & 27 & 24 & 85 & # -2 & 48 & 100 & # -3 & 8 & 24 & 80 & # -2 & 48 & 90 & # -5 & 422 & 1.5497/23.5 & 300 & 24 & 100 & # -2 & 48 & 100 & # -3 & 90 & 24 & 90 & # -2 & 48 & 100 & # -3 & 27 & 24 & 60 & # -2 & 48 & 95 & # -3 & 8 & 24 & 60 & # -2 & 48 & 75 & # -5 & 424 & 1.5551/23.5 & 300 & 24 & 85 & # -2 & 48 & 100 & # -3 & 90 & 24 & 60 & # -2 & 48 & 70 & # -5 & 426 & 1.5483/23.5 & 300 & 24 & 100 & # -2 & 48 & 100 & # -3 & 90 & 24 & 75 & # -2 & 48 & 75 & # -5 & 428 & 1.5497/23.5 & 300 & 24 & 100 & # -2 & 48 & 100 & # -3 & 90 & 24 & 100 & # -2 & 48 & 100 & # -5 & 429 & 1.5595/23.5 & 300 & 24 & 85 & # -2 & 48 & 100 & # -3 & 90 & 24 & 30 & # -2 & 48 & 60 & # -5 & 430 & 1.5700/21.5 & 300 & 24 & 100 & # -2 & 48 & 100 & # -3 & 90 & 24 & 75 & # -2 & 48 & 100 & ...

3-32 & 344-398 & Carbamoyl sulfides & insecticides & larvae were treated with solutions of definite concentrations of test compounds. Fifteen or twenty larvae were treated with each desired concentration and kept in a room at 25°C. Results were recorded 2 days after treatment & tobacco budworm larvae & 345 & 131-140 (dec) & 0.5 & 48 & 87 & # -3 & 0.25 & 48 & 73... .

В дальнейшем в режиме "Activity" происходит объединение содержимого файлов "Format" и "Value" и для каждого конкретного химического соединения информация в сгенерированном виде выводится на печать. Ниже продемонстрирована эта процедура на ряде примеров.

\*Activity:

ML = 3 & structure interval = 220-265 & chemical class = acylformamidine & test = insecticidal activity & application mode = kidney bean leaves are dipped in acetone-water solution of test chemical. After drying egg masses of insects were placed & insect = salt-marsh caterpillar & time after sprayed (days) = 7 & mortality (%) = 50 & structure number = 221 & concentration (%) = 0.03 \*

\*Activity:

ML = 3 & structure interval = 284-312 & chemical class = phosphoroimidophenyl & test = insecticidal activity & application mode = nasturtium plants were transplanted into sandy loam soil and infested with 25-50 black bean aphid. 24 hours later they were sprayed. Treated plants were held in the greenhouse and mortality was recorded & insect = black bean aphid – direct spray & time after sprayed (days) = 7 & structure number = 285 &  $n_D/(\text{grad C}) = 1.5644/20$  & m.p.(grad C) = & concentration (%) = 0.001 \*

\*Activity:

ML = 3 & structure interval = 313-333 & chemical class = alkylphosphonodithioate & test = insecticidal activity & application mode = lima bean leaves were dipped into the solution of test compound and then dried out of solution of the leaf. Five third instar larvae of southern armyworm were added to the leaf and after time percent of killing was recorded & insect = southern armyworm & time of holding (hours) = 72 & temperature = 72°F & structure number = 313 & concentration (ppm) = 100 & mortality (%) = 100 \*

\*Activity:

ML = 3 & structure interval = 399-435 & chemical class = phenylcyclopropane carboxylic acid derivatives & test = insecticides & application mode = ten of carmine mites were inoculated on cutting leaf-discs of kidney bean (diameter 1,5 cm). Half day after solution of test compounds with definite concentration were sprayed. Number of mortalities were measured after 24 hr and 48 hr and percent were calculated & insect = carmine mine & structure number = 401 &  $n_D/(\text{grad C}) = 1.5595/20$  & concentration (ppm) = 300 & time (hr) = 24 & mortality (%) = 100 & time (hr) = 48 & mortality (%) = 100 & concentration (ppm) = 90 & time (hr) = 24 & mortality (%) = 100 & time (hr) = 48 & mortality (%) = 100 & concentration (ppm) = 27 & time (hr) = 24 & mortality (%) = 85 & time (hr) = 48 & mortality (%) = 100 & concentration (ppm) = 8 & time (hr) = 24 & mortality (%) = 80 & time (hr) = 48 mortality (%) = 90 \*

В заключении отметим, что в результате проведенного патентного анализа формы представления биологической информации в части условий эксперимента и критериев оценки эффективности пестицидноактивных соединений с инсектицидным видом активности были разработаны наиболее типичные форматы, посредством которых на магнитных носителях нашла свое отражение вся наиболее ценная информация результатов тест-испытаний, при этом необходимо выделить следующие важные моменты.

Область применения и требования к качеству продукта: многие авторы решают задачу с позиций взаимосвязанных условий – низкой себестоимости препаратов, малой их токсичности и безвредности для организма млекопитающих животных, вместе с тем высокая инсектицидная активность и быстрота действия, что предопределяет возможность их использования без особых ограничений в сельском хозяйстве для обработки зерновых культур перед уборкой урожая, в домашнем садоводстве, лесоводстве, при выращивании культур в теплицах и при упаковке продуктов питания.

Формы применения препаратов: это разнообразные растворы, эмульсии, смачивающие порошки, суспензии, порошки, пылевидные препараты, пены, пасты, растворимые порошки, грануляты, аэрозоли, суспензионно-эмульсионные концентраты, порошки для посевного материала, пропитанные действующим началом – естественные и синтетические вещества, микроинкапсулирования в полимерных веществах и оболочках для посевного материала, в препаратах с горючим составом, таких как патроны, чашки и спирали для окуривания, а также в препаратах для горючего и холодного способов образования тумана.

Приготовление препаратов для непосредственного применения: смешиванием исходного препарата с жидкими растворителями под действием давления сжиженными газами, или твердыми носителями при необходимости применения их в виде ПАВ, в ряде случаев используются смешанные водно-органические растворители.

Диапазон концентрационных условий: инсектицидное средство обычно содержит 0,1 – 95 %, но чаще 0,5 – 90 % масс. действующего начала.



Концентрацию действующего начала в готовых препаратах варьируют в широких пределах:  $10^{-4}$  – 10 %, в большинстве случаев преимущественно  $10^{-2}$  – 1 %.

Наконец, непосредственные результаты тест-испытаний в виде набора данных: химические структуры соединений, разновидности растений, насекомые, период после обработки, температура и оценка воздействия (степень умерщвления насекомых).

Последнее обстоятельство будет иметь большое значение в дальнейшем при статистической обработке большого массива данных с целью поиска статистически значимых весов структурных фрагментов молекул по определенному виду биологической активности. Поэтому немаловажным моментом является отражение информации по классификации испытуемых соединений. К соединениям, проявившим высокую инсектицидную активность, необходимо отнести следующие: циклопропанкарбоновые кислоты; сульфоамины; различные фосфорорганические соединения; карбаматы; производные формамидина, имидазина, пиримидина, этилендиамина, дифенилового эфира, нитрофенола. В качестве радикалов (заместителей) в группировках атомов, составляющих основу соединения, необходимо отметить следующие: алкил, арил, кислород, сера, алкокси, гидрокси, карбокси, ацил, галоген, нитро, циано, амидные и фосфатные группировки в разных положениях по отношению друг к другу и циклу.

### **Список литературы:**

1. Гаврилов Д.А., Шуваев А.В. Обработка патентной информации и создание базы данных соединений с росторегулируемой активностью: Химия и жизнь: сб. статей XVIII междунар. науч.-практ. конф. / Новосиб. гос. аграрн. ун-т. – Новосибирск, 2019. – С. 57 – 62.

2. Шуваев А.В. Биологический аспект проблемы построения базы данных биологически активных соединений // Наука и Образование. – 2019. – № 2. – С. 23.

3. Шуваев А.В. Основы построения базы данных биологически активных химических соединений для решения экологических вопросов: Вопросы строительства и инженерного оборудования объектов железнодорожного

транспорта. Материалы научно–практической конференции. – СГУПС. – 2017. – С. 147 – 157.

4. Шуваев А.В. Подготовка патентной химической структурной информации к вводу в базу данных биологически активных химических соединений // Экономика: экономика и сельское хозяйство. – 2018. – № 2 (26). – С. 5.

5. Шуваев А.В. Обработка патентной информации пестицидно активных соединений с фунгицидным видом активности // Наука и Образование. – 2020. – № 1. – С. 124.

6. Шуваев А.В. Обработка патентной информации пестицидноактивных соединений с росторегулируемым видом активности // Наука и Образование. – 2021. – Т. 4 – № 1.

7. Cheng J.D. Insecticidal carbamoyl sulfides. Patent USA. № 4254141. Filed 24.04.1980: publ. data 3.03.1981, 24 p.

8. Fahmy M.A., Edison N.J. O-aryl-S-branched alkylphosphonodithioate insecticidal and nematocidal compounds. Patent USA. № 4284626. Filed 31.12.1979: publ. data 18.08.1981, 13 p.

9. Gutman A.D. Phosphoroimidophenyl insecticides. Patent USA. № 4219547. Filed 18.03.1976: publ. data 26.08.1980, 12 p.

10. Ozawa K., Ishii S. Insecticidal and acaricidal phenylcyclopropane carboxylic acid derivatives and insecticidal and acaricidal compositions thereof. Patent Japan. № 94952. Filed 16.11.1979: publ. data 28.04.1981, 16 p.

11. Pallos F.M. Acylformamidine insecticidal and miticidal compounds. Patent USA. № 4207334. Filed 5.10.1978: publ. data, 10.06.1980, 12 p.

UDC 632.951

## PROCESSING OF PESTICIDALLY ACTIVE COMPOUNDS WITH INSECTICIDAL ACTIVITY ON THE BASE OF PATENT INFORMATION

**Alexander V. Shuvaev**

PhD in Chemistry, docent, [shuvaev53@mail.ru](mailto:shuvaev53@mail.ru)

Siberian Transport University,

Novosibirsk, Russia

**Annotation.** The analysis of patent data containing information on pesticide-active chemical compounds with insecticidal activity has been carried out. The most typical formats have been developed, on the base of which the biological tests results were processed with the subsequent input of information into the database.

**Keywords:** bioactive compounds, chemical structure, biological processing of patent information, the database, the generation of biological information.

Статья поступила в редакцию 15.01.2022; одобрена после рецензирования 15.02.2022; принята к публикации 18.03.2022. The article was submitted 15.01.2022; approved after reviewing 15.02.2022; accepted for publication 18.03.2022.