وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
Ministry of Higher Education and Scientific Research
جامعة قاصدي مرباح ورقلة
University of Kassadi Merbah Ouargla
كلية الرياضيات وعلوم المادة
Faculty of Mathematics and Matter Sciences
قسم الكيمياء
Chemistry department

مذكرة مقدمة لنيل شهادة ماستر أكاديمي

في الكيمياء

التخصص: كيمياء المحيط

من إعداد: عاطي دنيا

هامل كريمة

بعنوان:

A group-interaction contribution method for estimating the toxicity of pesticide using approach non-linear

نوقشت علنا يوم: 2021/06/07

أمام لجنة المناقشة المكونة من:

د.هادف الدراجي	أستاذ محاضر – أ–	رئيسا
د.زروقي حياة	أستاذ محاضر – ب–	مناقشا
د.مقدم خضرة	أستاذ محاضر – أ–	مشرفا
د.بالفار محمد الأخضر	أستاذ محاضر – أ–	مساعد المشرف

الموسم الجامعي: 2020-2021

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
Ministry of Higher Education and Scientific Research
جامعة قاصدي مرباح ورقلة
University of Kassadi Merbah Ouargla
كلية الرياضيات وعلوم المادة
Faculty of Mathematics and Matter Sciences
قسم الكيمياء
chemistry department

مذكرة مقدمة لنيل شهادة ماستر أكاديمي
في الكيمياء
التخصص: كيمياء المحيط
من إعداد: عاطي دنيا ـ هامل كريمة

بعنوان:

A group-interaction contribution method for estimating the toxicity of pesticide using approach non-linear

نوقشت علنا يوم:2021/06/07
أمام لجنة المناقشة المكونة من:

د.هادف الدراجي	أستاذ محاضر ــأــ	رئيسا
د.زروقي حياة	أستاذ محاضر ــبــ	مناقشا
د.مقدم خضرة	أستاذ محاضر ــأــ	مشرفا
د.بالفار محمد الأخضر	أستاذ محاضر ــأــ	مساعد المشرف

الموسم الجامعي: 2020-2021

إهداء

الحمد لله الذي جعل لنا من العلم نورا نهتدي به،

إلى النور الذي أنار دربي، إلى السراج الذي لا ينطفئ، إلى من بذل جهد السنين من أجل أن أعتلي سلالم النجاح عن روح أبي الطاهرة الزكية

إلى التي جعل الله الجنة تحت قدميها إلى من سقتني من نبع رقتها وصدقها أغلى من ربتني صغيرا ونصحتني كبيرا أمي الغالية

إلى فواكه الحياة والحب المملوء بالشغب الجميل، إخوتي الأحبة كل باسمه

إلى كل من علمني حرفا في هذه الدنيا الفانية

أهدي هذا العمل المتواضع لكل أقاربي، لكل من أعانني ولو بدعوة خير

ونسأل الله أن يجعله نبراسا لكل طالب علم.

هامل كريمة

إهداء

إلى صاحب السيرة العطرة، والفكر المُستنير؛ فلقد كان له الفضل الأوَّل في بلوغي التعليم العالي (أبي الحبيب)، أطال الله في عُمره.

إلى من وضعتني على طريق الحياة، وجعلتني رابط الجأش، وراعتني حتى صرت كبيرًا (أمي الغالية)، طيَّب الله ثراها.

إلى إخوتي الكرام: الحنونة إكرام، العزيزة مايسة، سندي محمد الأمين، المدلل شراف الدين وكتكوت العائلة تيم الله و أعز صديقاتي سندس و إلى من ساعدني في إنجاز هذا العمل سيف الدين ومن كان لهم بالغ الأثر في كثير من العقبات والصعاب.

إلى جميع أساتذتي الكرام؛ ممن لم يتوانوا في مد يد العون لي.

عاطي دنيا

شكر وعرفان

عن أبي هريرة – رضي الله عنه – قال – صلى الله عليه وسلم– : { مَن لا يَشكُر الناس، لا يَشكُر الله}.

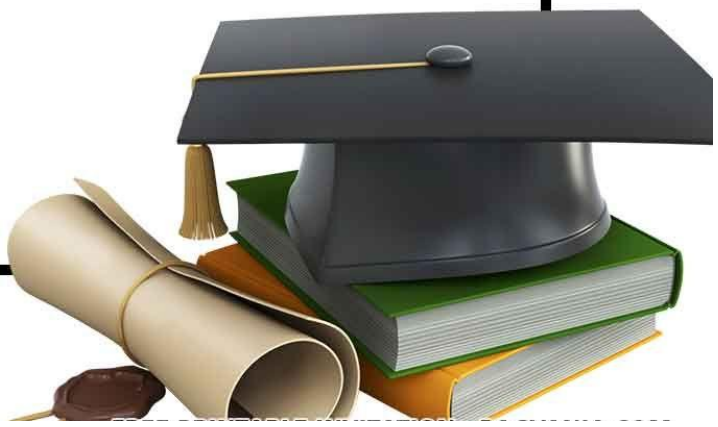
من منطلق هذا الحديث الشريف وقبل كل شيء، نشكر الله تعالى على أن وفقنا لهاته اللحظة وعلى الصحة والإرادة التي رزقنا إياها لتتمة هذه المذكرة " الحمد لله".

كل الامتنان والتقدير للمشرفة الدكتورة مقدم خضرة ، أستاذة بجامعة قاصدي مرباح – ورقلة– ونشكرها على موافقتها على توجيه محتوى مذكرتنا وعلى ملاحظاتها وتعليقاتها بخصوص الجانب العملي التطبيقي أو النظري رغم الظروف الصعبة التي مرت بها.

كما نتقدم بجزيل الشكر والتقدير للمساعدة الأستاذ ورئيس القسم الكيمياء الدكتور بالفار محمد الأخضر، أستاذ بجامعة قاصدي مرباح – ورقلة– ، الذي لم يبخل علينا أبدا بتوجيهاته ونصائحه المفيدة طيلة فترة دراستنا بـ الجامعة، دعواتنا لك.

نتقدم بالشكر الخاص الدكتور هادف الدراجي الذي شرفنا برئاسة لجنة المناقشة، الدكتورة حياة زروقي على قبولها مناقشة هذا البحث وإثرائها بالنصائح والإرشادات.

نسأل الله العلي القدير أن يجزيهم خير الجزاء ويجعل هذا في ميزان حسناتهم.



ملخص الدراسة

الملخص:

تعتبر خاصية الجرعة المميتة 50% (LD_{50}) مرشح الافضل لتقدير مخاطر الصحة والسلامة البيئية لمركبات من النوع مبيد، والتي تمثل جرعة مفردة من مادة تؤدي الى قتل50% مجموعة من الكائنات الحي (إنسان، حيوان، فطريات، نبات)؛ تم الإعتماد لتقدير والتنبؤ بإستعمال طريقة مساهمة المجموعات المتداخلة (Group–Interaction Contribution (GIC)) ،في هذه الدراسة حضر قاعدة معطيات تحوى 628 قيمة تجريبية لمركبات لأنظمة مبيدات مختلفة (نباتات، فطريات وحشرات) وذات تأثيرات مختلفة منها تأثير السمية العصبية Neurotoxicity ، تأثير تثبيط التخليق الحيويBiosynthesis inhibition، وتأثير تنظيم النموGrowth regulation، وتأثير تعديل التمثيل الضوئي Phdosynthesis modulation؛ تم الحصول على المعاملات الإحصائية منها معامل الإرتباط (R^2) خطي0.782،0.757، 0.840 وغير خطي 0.866، 0.911 على توالي وكذلك الخطأ النسبي (AARD%)23.769، 5.157، 3.078، 3.391، 2.497 على الترتيب.

الكلمات الدالة: مساهمة المجموعات المتداخلة، مبيدات، الجرعة المميتة 50%، التقدير.

Abstract:

The lethal dose (LD_{50}) characteristic of 50% is considered the best candidate for assessing the environmental health and safety risks of pesticide-type compounds, which represent a single dose of a substance that kills 50% of a group of organisms (human, animal, fungi, plant); It was relied to estimate and predict using the Group-Interaction Contributio (GIC). In this study, a database containing 628 experimental values was prepared for compounds of different pesticide regimens (plants, fungi and insects) with different effects, including neurotoxicity, inhibition effect. Biosynthesis inhibition, growth regulation, and Phdosynthesis modulation; Statistical coefficients were obtained, including the correlation coefficient (R^2) linearly 0.757, 0.782, 0.840, and non-linear 0.866, 0.911, respectively, as well as the relative error (AARD %) 23.769, 5.157, 3.078, 3.391, and 2.497, respectively.

Key words: Group-Interaction Contribution, pesticides, LD_{50}, estimate.

الفهرس

الإهداء	
شكر وعرفان	
الملخص	
الفهرس	
قائمة الجداول	
قائمة الأشكال	
مقدمة عامة	02
المراجع	04
الفصل الأول : عموميات حول المبيدات	
I.1.تعريف المبيد	06
I.2. بعض خصائص الفيزيائية و الكيميائية للمبيد	06
I.1.2.نصف عمر التربة (The soil half-life)	06
I.2.2. معامل الامتصاص (Koc)	06
I.3.2.درجة الوجود في المياه الجوفية أو GUS	06
I.4.2.تصنيف حركة المبيدات	07
I.5.2.ضغط البخار	07
I.6.2. ثابت قانون هنري	07
I.7.2.ثابت الحموضة pKa	07
I.3.تصنيف المبيدات	07
I.1.3.تصنيف تقليدي	08
I.1.1.3. مبيدات النباتات	08
I.2.1.3. مبيدات الفطريات	09
I.3.1.3. مبيدات الحشرات	09
I.2.3. تصنيف الأكثر شيوعا	09
I.1.2.3. التصنيف على أساس طريقة الدخول	09
I.1.1.2.3. مبيدات الآفات الجهازية	09
I.2.1.2.3..مبيدات الآفات غير الجهازية (الملامسة)	10

I.3.1.2.3. مبيدات تسمم المعدة والمواد السامة في المعدة	10
I.4.1.2.3. مبيدات التبخير	11
I.5.1.2.3. طارد	11
I.2.2.3. التصنيف على أساس وظيفة المبيدات والآفات	11
I.3.2.3. التصنيف على أساس التركيب الكيميائي لمبيدات الآفات	12
I.1.3.2.3. كلور عضوي	13
I.2.3.2.3. الفوسفات العضوي	14
I.3.3.2.3. الكربامات	14
I.4.3.2.3. البيريثرويدات الاصطناعية	15
I.4. أصناف مبيدات الآفات الثانوية الأخرى	15
I.1.4. التصنيف على أساس طريقة العمل	16
I.2.4. التصنيف على أساس مصادر المنشأ	16
I.1.2.4. المبيدات الميكروبية	17
I.2.2.4. الواقيات النباتية المدمجة	17
I.3.2.4. مبيدات الآفات البيوكيميائية	17
I.3.4. بناءً على نطاق الهدف فإنه يقتل	17
I.4.4. بناءً على أنواع تركيبات مبيدات الآفات	18
I.1.4.4. السوائل	18
I.2.4.4. مساحيق	19
I.3.4.4. حبيبات	19
I.4.4.4. الطعوم	19
I.5.4.4. تراب	19
I.6.4.4. سائل منخفض الحجم للغاية	19
I.5.4. بناء على سمية المبيدات	20
I.5. أنواع السمية	20
I.1.5. السمية الحادة	20
I.2.5. السمية المزمنة	21

I.6. تصنيف السمية	21
I.6.1. تصنيف منظمة الصحة العالمية (WHO) للسمية الحادة لمبيدات الآفات	21
I.6.2. تصنيف وكالة حماية البيئة (EPA)، الولايات المتحدة الأمريكي (USA)	21
I.6.2.1. المبيدات الآفات السمية الحادة	21
I.6.2.2. المبيدات الآفات الجلدية وتهيج العين	22
I.7. تأثير المبيدات	22
I.7.1. التأثير المحتمل على صحة الإنسان	22
I.7.1.1. تأثير حاد	22
I.7.1.2. التأثير المزمن	23
I.7.2. التأثيرات على البيئة	23
I.7.2.1. التأثيرات على الكائن غير المستهدف	23
I.7.2.2. فقدان التنوع البيولوجي	24
I.7.2.3. التأثيرات على النباتات الدقيقة في التربة	24
I.7.2.4. التأثيرات على النظام البيئي للمياه والهواء	25
I.8. الوضع الحالي للمبيدات	25
I.8.1. المبيدات في العالم	25
I.8.2. المبيدات في الجزائر	26
I.9. علامات وأعراض التسمم بالمبيدات	27
I.10. المراجع	28
الفصل الثاني: بعض الدراسات السابقة و طرق النمذجة المستعملة حول حساب خاصية LD_{50}	
II.1. تعريف النمذجة	30
II.2. تعريف النمذجة الرياضية	30
II.3. أسباب استخدام النمذجة الرياضية	30
II.4. التعريف بالطرق المستخدمة لتقدير بعض الخصائص اعتمادا على الصيغة	30
II.4.1. النمذجة بـ QSTR (Quantitative Relation Structure of Toxicity)	30
II.4.2.النمذجة بـ GC (Contribution Group)	31
II.4.3. GIC (Group Interaction contribution) طريقة مجموعة المساهمات المتداخلة	31

II.5. تحليل بعض الدراسات السابقة لتقدير LD_{50}	31
II.6. خلاصة الفصل الثاني	34
II 7. المراجع	35
الفصل الثالث: الدراسة الوصفية و التقنية لطريقة تقدير متوسط الجرعة المميتة LD_{50}	
III.1. تعريف الجرعة المميتة 50%	37
III.2. قاعدة المعطيات المستعملة	38
III.3. تحديد طرق التقدير، الخوارزمية	40
III.4. الدقة	41
III.5.خلاصة الفصل الثالث	42
III.6. المراجع	43
الفصل الرابع:النتائج ومناقشتها، مقارنتها	
IV.1. النتائج	45
IV.1.1 . النظام البيئي للحشرات	45
IV.1.2 . النظام البيئي للفطريات	45
IV.1.3 . النظام البيئي للنباتات	46
IV.2. مناقشة النتائج	47
IV.3. المقارنة	50
IV.3. خلاصة الفصل الرابع	51
IV.4.المراجع	52
الخلاصة العامة	54
المراجع	55
الإنجاز العلمي	57
الملاحق	59

قائمة الجداول

رقم الجدول	العنوان	الصفحة
	الفصل الأول : عموميات حول المبيدات	
الجدول I.1	تصنيف مبيدات الآفات المستهدفة	12
الجدول I.2	تصنيف مستوى السمية لـ WHO	20
الجدول I.3	تصنيف السمية الحادة لمبيدات الآفات حسب منظمة الصحة العالمية (WHO)	21
الجدول I.4	تصنيف السمية الحادة لمبيدات الآفات حسب وكالة حماية البيئة (EPA)	21
الجدول I.5	تصنيف السمية المبيدات حسب تأثير بصري و جلدي ل (EPA)	22
	الفصل الثاني: بعض الدراسات السابقة و طرق النمذجة المستعملة	
الجدول II.1	بعض النماذج السابقة لتقدير خاصية LD_{50}	32
	الفصل الثالث:الدراسة الوصفية	
الجدول III.1	النتائج الإحصائية لعدد مركبات موجودة في كل تأثير في قاعدة البيانات.	39
	الفصل الرابع:النتائج و المناقشة، مقارنتها	
الجدول IV.1	مثال تطبيقي لتقدير السمية المبيدات لنظام حشري	45
الجدول IV.2	.مثال تطبيقي لتقدير السمية المبيدات لنظام للفطريات	46
الجدول IV.3	مثال تطبيقي لتقدير السمية المبيدات النباتية حسب التأثيرات المدروسة	47
الجدول IV.4	النتائج الإحصائية لنموذج المقترحة بطريقة لخاصية LD_{50}	49
الجدول IV.6	توزيع الخطأ النسبي وعدد المركبات	50
الجدول IV.7	مقارنة قيم الخطأ النسبي للدراسة السابقة بالقيم التجريبية	50

قائمة الأشكال

الرقم	العنوان	الصفحة
الفصل الأول : عموميات حول المبيدات		
الشكل I.1	رسم تخطيطي لتصنيف على أساس طريقة الدخول	09
الشكل I.2	المركب 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid	10
الشكل I.3	المركب Paraquat	10
الشكل I.4.	المركب Malathion	10
الشكل I.5	رسم تخطيطي لتصنيف المبيدات الحشرية	13
الشكل I.6	المركب DDT	14
الشكل I.7	المركبParathion	14
الشكل I.8	المركب Cypermethrin	15
الشكل I.9	رسم تخطيطي لتصنيف مبيدات الآفات الثانوية	15
الشكل I.10	رسم تخطيطي لتصنيف على أساس طريق العمل	16
الشكل I.11	رسم تخطيطي لتصنيف على أساس مصادر المنشأ	17
الشكل I.12	رسم تخطيطي لأنواع تركيبات مبيدات الآفات	18
الشكل I.13	الدول الأكثر استعمالا للمبيدات	26
الشكل I.14.	كمية المبيدات المستعلمة من طرف دول المغرب العربي	27
لفصل الثاني: بعض الدراسات السابقة و طرق النمذجة المستعملة حول حساب خاصية LD_{50}		
الشكل II.1	رسم تخطيطي للمراحل التي مرت بها من 2004 – 2017	33
الفصل الثالث:الدراسة الوصفية		
الشكل III.1.	الشكل العام لقاعدة البيانات	38
الشكل III.2	يمثل نسب كل من نظام و تأثيره متوجد في قاعدة البيانات.	39
الشكل III.3.	خورزمية من أجل حساب أي خاصية إبتداءا من الخاصية الجزيئية إستعمال GIC مع طريقة تقسيم المركبات	41
الفصل الرابع:النتائج و المناقشة		
الشكل IV.1.	مقارنة بين الخطأ النسبي التجريبي والمحسوب لمساهمة المجوعات المتداخلة	48
الشكل IV.2	الخطأ النسبي لكل مركبات متواجد حسب تأثيرها في قاعدة البيانات	51

قائمة الرموز والإختصارات

الرموز والإختصارات		
USA	United States of America	الولايات المتحدة الامريكية
USEPA	United States Environmental Protection Agency	وكالة حماية النبات
Koc	Attenuation Coefficient	معامل الإمتصاص
Pka	Acidity constant	ثابت الحموضة
WHO	World Health Organization	منظمة الصحة العالمية
LC_{50}	Lethal dose 50	تركيز المميتة 50%
LD_{50}	lethal concentration 50	الجرعة المميتة 50%
EPA	Environmental Protection Agency	وكالة حماية البيئة
ULV	Ultra low volume	حجم منخفض للغاية
QSPR	Quantitative structure- property relationships	العلاقةالكميةبينالخاصيةوالفعالية
GC	Group contribution	مساهمة المجموعات
GIC	group-interaction contribution	مساهمة المجموعات المتداخلة
SGC	Structural group contribution	مساهمة المجموعة البنيوية
AAD	Average Absolute Deviation	متوسط الإنحراف المطلق
%AARD	Average Absolute Relative Deviation	متوسط الإنحراف النسبي
R^2	Correlation coefficient	معامل الإرتباط
DTB	Decision Tree Boost	تعزيز شجرة القرار
DTF	Decision Tree Forest	غابة شجرة القرار
SDT	Single Decision Tree	شجرة قرار واحدة
Nj	عددمساهمة مجموعة المتداخلة	
ΔCj	مساهمة مجموعة المتداخلة من نوع j في الجزئي	
LD_{50i}^{EXP}	قيم الخاصية التجريبية الجرعة المميتة 50%	
LD_{50i}^{EXP}	قيم الخاصية المحسوبة الجرعة المميتة 50%	
N	عدد بيانات قاعدة المعطيات المدروسة	
Precision	الدقة	

مقدمة عامة

مقدمة عامة

تم اكتشاف المبيدات في مكافحة الآفات منذ العصور القديمة من طرف الصينيين، شرعت في الانتشار والتطور عبر الزمن، حيث لقيت المبيدات اهتماما كبيرا من قبل العلماء و المستكشفين و الهيئات الأكاديمية والصناعية في العديد من المجالات مثل: الكيمياء ،الفيزياء، الهندسة، علوم المواد، الزراعة، والكيمياء الحيوية الجزئية وحتى في مجال الطب .

ولقد شهدت السنوات الأخيرة تزايدا ملحوظا في إنتاج المبيدات الكيميائية في العالم، وتستخدم بشكل مفرط بكل أنواعها، كما أنها ساهمت المبيدات في الحد والقضاء على العديد من الآفات الضارة بالنباتات، فهي قادرة كذلك على إبادة الحشرات الناقلة للأمراض سواء للإنسان أو الحيوان ،توجد أنواع كثيرة منها تختلف حسب الآفة منها مبيدات الحشرات Insecticides، مبيد الأعشاب الضارة Herbicides، مبيدات الفطريات Fongicides، ومبيدات القوارض Rodenticides . وكل نوع من الأنواع المذكورة سابقا يضم مجموعة أو مجاميع من المركبات الكيميائية تتشابه أو تختلف الواحدة منها عن الأخرى، وإن كان منشأ الجميع من الناحية التركيبية إما عضوية أو معدنيا أو مشتركا[1].

بما أن المبيدات من المركبات الأكثر تصنيعا أو استخدامها يحتاج إلى التحري الدقيق في مجال السلامة الصحية والبيئية ، لذا يستوجب تحديد العديد من خصائصها، وبالأخص المركبات التي لها استعمالات واسعة في القطاعات الصناعية وكيفية تفادي المشاكل الناتجة عنها.

إن البيانات التجريبية لتقدير خاصية سمية القاتلة 50%(LD_{50})للمبيدات ضرورية لدراسة هذه ظاهرة، لكن ندرة وقلة البيانات حالت دون ذلك، لهذا ارتأينا في هذه الدراسة إلى محاولة إعطاء نماذج رياضية نظرية لإحدى خواص المبيدات بالغة الأهمية وهي خاصية تقدير سمية قاتلة 50%للمبيدات (LD_{50}).

يوجد العديد من الطرق في المراجع لحساب تقدير سمية قاتلة 50%للمبيدات (LD_{50})على أساس نماذج رياضية، منها: العلاقة الكمية بين البنية والخاصية QSPR (Quantitative structure–property relationship) ومساهمة المجموعة الهيكلية SGC (structural group contribution) ، وعلى الرغم من المجهود المبذولة في هذه النماذج إلا أنها ليست كافية وهذا راجع لمحدودية وعدم توفر العدد الكافي من المعلومات التجريبية [2-3].

تهدف الطريقة المستخدمة إلى إعطاء وتطوير نموذج لتقدير وتنبؤه لسمية القاتلة 50%(LD_{50})باستعمال مساهمة المجموعات المتداخلة(Group–Interaction Contribution(GIG) بدقة عالية مقارنة بالنتائج التجريبية[4]، والمقارنة بين النماذج المتحصل عليها والنماذج السابقة من حيث الدقة والموثوقية والقوة التنبؤية للنموذج، و بذلك تعكس هذه النمذجة القواعد التالية :

- تكاليف منخفضة لعملية قياس وتقدير خاصية سمية قاتلة 50%للمبيدات مرتفعة الثمن.
- إمكانية التنبؤ بقيمة سمية قاتلة 50% للمبيدات اعتمادا على صيغة المركبات التي لا تنتمي إلى قاعدة المعطيات المستعملة ، دون الحاجة إلى إجراء أي تجارب أو اختبار.
- المزيد من النهج التي تساعد على السلامة والوقاية والأمن الصناعي.

وتم تقسيم هذه المذكرة إلى:

- **الفصل الأول**: وهي مجموعة من المعلومات وعموميات حول المبيدات: تعريفها وتصنيفها و تأثيرها ونختم بمخاطرها على البيئة.
- **الفصل الثاني**: يعطي أهم الدراسات السابقة على المبيدات و تعريفات لطرق النمذجة المستعملة حولها.
- **الفصل الثالث**: وهو قلب الموضوع إذ يعطي الشكل الوصفي لتقنية تقدير سمية قاتلة50%للمبيدات في جمع واختيار قاعدة البيانات للخاصية ، وتحديد الطريقة المستعملة والدقة، وأخيرا التحقق من صحة النماذج.
- **الفصل الرابع**: يتضمن النتائج ومقارنتها بالأساليب السابقة، وفي الختام تعطى النتائج المهمة والآفاق لخلاصة لهذا العمل.

المراجع:

[1] J.M. Katz, C.KWinter Comparison of pesticide exposure from consumption of domestic and imported fruits and vegetables. Food and Chemical Toxicology, 47(2), 335–338.(2009).

[2]. K.Mokadem, M.Korichi, K.Tumba, A new group-interaction contribution method topredict the thermal decomposition temperature of ionic liquids, Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 157, 189-195. http://dx.doi.org/10.1016/j.chemolab..08.001, (2016).

[3]. Marrero-Morej_on J., Pardillo-Fontdevila E., Estimation of pure compound propertiesusing group-interaction contributions, AIChE J. 45 ,615-621(1999).

[4 T. M. Martina, C. R. Lilavoisb and M. G. Barronb, Prediction of pesticide acute toxicity using twodimensional chemical descriptors and target.
species classification, jornal homepage : http://www.tandefonline.com/loi/gsar20, (2017).

الفصل الأول

عموميات حول المبيدات

1.I.تعريف المبيد

هو أي مادة أو خليط من المواد المعدة يكون الغرض منه للوقاية من تدمير أو صد أو التقليل من ضرر أي آفة من الآفات. يمكن للآفة أن تكون حشرات ومسببات الأمراض النباتية ، والأعشاب والرخويات والطيور والثدييات، والأسماك الديدان الخيطية (الديدان الأسطوانية) ، والميكروبات التي تتنافس مع البشر على الغذاء[1]. وهي عبارة عن مواد طبيعية، مصنعة أو شبه مصنعة تستعمل ضد الكائنات المخربة، الأمراض والأعشاب الضارة[2].

عرّفت وكالة حماية النبات USEPA في USA المبيدات على أنها أي مادة يتوقع منها أن تمنع، تخرب، تبعد أو تضعف أي طفيلي وهذا يتضمن: مبيدات الحشرات، مبيدات الفطريات، مبيدات الطحالب ومواد أخرى[3].

يتم استخدام مبيدات الآفات في قطاع الصحة والمحاصيل الزراعية. فهي مفيدة في الصحة العامة لقتل ناقلات المرض، مثل البعوض، والآفات التي تضر بالمحاصيل الزراعية تقتل بالمبيدات. من الطبيعي أن تكون مبيدات الآفات سامة للآخرين؛ الكائنات الحية غير المستهدفة، بما في ذلك البشر. وبالتالي، من الضروري استخدامها بأمان والتخلص منها بشكل صحيح[1].

2.I. بعض الخصائص الفيزيائية و الكيميائية للمبيد

تم تنظيم بعض الخصائص الفيزيائية والكيميائية للمبيدات الآفات التي يمكن أن تصف متغيراتها في البيئة[4].

1.2.I. نصف عمر التربة(The soil half-life)

هو مقياس لمدى ثبات مبيد الآفات في التربة. يمكن تصنيف مبيدات الآفات على أساس نصف عمرها على أنها غير ثابتة، وتتحلل إلى نصف التركيز الأصلي في أقل من 30يومًا؛ يتحلل إلى نصف التركيز الأصلي في 30إلى 100يوم؛ أو مستمر يستغرق أكثر من 100يوم حتى يتحلل إلى نصف التركيز الأصلي. قيمة "نصف العمر النموذجي للتربة" هي قيمة تقريبية وقد تختلف بشكل كبير لأن الثبات حساس للتغيرات في الموقع والتربة والمناخ[4].

2.2.I. معامل الامتصاص(Koc)

يصف ميل مبيد الآفات لربط جزيئات التربة، إن الامتصاص يؤخر الحركة ويمكن أيضا زيادة المثابرة لأن مبيدات الآفات محمية من التدهور. كلما إرتفاع Koc، زاد إمكانية الامتصاص مشتق Koc من بيانات المختبر. كثير من التربة وعوامل مبيدات الآفات قد تؤثر على الامتصاص الفعلي لمبيد الآفات في التربة[4].

3.2.I. درجة الوجود في المياه الجوفية أوGUS

درجة الوجود في المياه الجوفية أوGUS مشتقة تجريبياً القيمة التي تتعلق بثبات مبيدات الآفات (نصف العمر) والامتصاص في التربة (معامل الامتصاص Koc)، يجوز لـ GUSتستخدم في تصنيف المبيدات لاحتمالية انتقالها نحو المياه الجوفية؛ مشتق GUSعلى النحو التالي[4]:

$$GUS = \log10\ (\text{نصف عمر}) \times [4 - \log10\ (Koc)]$$

4.2.I. تصنيف حركة المبيدات

هو مشتق من GUS حركة تتراوح التقييمات من منخفضة للغاية إلى عالي جدا. مبيدات الآفات مع GUS أقل من 0.1 لها قيمة منخفضة للغاية إمكانية التحرك نحو المياه الجوفية. مبيدات الآفات مع GUS اكبر من 0.4 لديها إمكانية عالية جدا التحرك نحو المياه الجوفية. يصف الذوبان في الماء كمية المبيدات التي ستذوب. تم تحديد القيم المبلغ عنها. في درجة حرارة الغرفة (20درجة مئوية أو 25درجة مئوية). كلما زادت قيمة الذوبان، فإن أكثر قابلية للذوبان في المبيدات، زادت قابلية الذوبان للمبيد. من المرجح أن تتم إزالة مبيدات الآفات شديدة الذوبان من التربة عن طريق الجريان السطحي أو عن طريق التحرك أسفل منطقة الجذر بالماء الزائد ماء فائض[4].

5.2.I. ضغط البخار

هو مقياس لميل مبيدات الآفات إلى التطاير، يتم سرد القيم الموجودة في قاعدة البيانات هذه في الترميز العلمي. مبيدات الآفات ذات ضغط بخار أقل من 10^{-8} لديها قدرة منخفضة على التطاير. مبيدات الآفات ذات ضغط بخار أكبر من 10^{-3}لديها قدرة عالية على التطاير[4].

6.2.I. ثابت قانون هنري

يصف ثابت قانون هندي ميل مبيد الآفات إلى التطاير من الماء أو التربة الرطبة، ويتم حسابه باستخدام ضغط بخار المبيد وقابلية الذوبان في الماء والوزن الجزيئي. تشير قاعدة البيانات هذه إلى فهرس قانون هنري بالتدوين العلمي كوحدات بلا أبعاد. تمتلك المبيدات الحشرية ذات الأعداد الكبيرة إمكانية عالية للتطاير من التربة الرطبة[4].

7.2.I. ثابت الحموضة pKa

يتم إعطاء قيم pKa لمبيدات الآفات التي هي أحماض أو قواعد ضعيفة. إن pKa هو مقياس قوة حمض أو قاعدة (مثل حمض متقارن) بالنسبة إلى الماء. يصف الرقم الهيدروجيني الذي تتواجد فيه الأشكال المنفصلة والمرتبطة بالحمض أو القاعدة في أجزاء متساوية. يمكن أن يؤثر pKa على قابلية الذوبان في الماء، وامتصاص التربة، والفقد المتطاير، والتحلل الكيميائي والبيولوجي عبر مجموعة من قيم الأس الهيدروجيني للتربة[4].

3.I. تصنيف المبيدات

المبيدات مصطلح شاسع له عدة تصنيفات، تستخدم إما لقتل الآفات أو الحماية منها. تختلف الفئات حسب الخواص الفيزيائية والكيميائية. لذلك يرتكز تصنيف المبيدات تقليديا على طبيعة الهدف، طريقة العمل والعائلة وفقا لطبيعة الهدف[2]، وتضم:

- مبيدات الفطريات.

- مبيدات النباتات.
- مبيدات الحشرات.

أما حاليا هناك ثلاث طرق الأكثر شيوعًا لتصنيف المبيدات[1]. هذه الطرق الثلاثة الشائعة لفئات المبيدات تشمل:

- التصنيف على أساس طريقة الدخول.
- التصنيف على أساس وظيفة مبيدات الآفات والكائن الحي.
- التصنيف على أساس التركيب الكيميائي للمبيد.

1.3.I. تصنيف تقليدي

تم تصنيف المبيدات تقليديا على طبيعة الهدف، طريقة العمل والعائلة أو الطبيعة الكيميائية، حيث اعتمد هذا التصنيف على طبيعة الهدف[2]، ويتضمن ما يلي:

- مبيدات الفطريات: المكافحة ضد الفطريات.
- مبيدات النباتات: المكافحة ضد الأعشاب الضارة أو الحد من تطورها الطبيعي.
- مبيدات الحشرات: المكافحة ضد الحشرات المؤذية لنمو المحاصيل الزراعية أو لنوعية المنتج.

1.1.3.I. مبيدات النباتات

مواد كيميائية تحدث خلل في الوظائف الفيزيولوجية للنبات؛ ما يسبب موته أو التقليل من نموه، مبيدات النباتات الضارة المستعملة حاليا هي ذات أصل معدني أو ذات طبيعة عضوية، و لكن التسميد العصري يتطلب أساسا المبيدات أو المركبات العضوية المصنعة. يملك كل مبيد لنبات الضارة خصائص متميزة تبعا لمكوناته، طريقة امتصاصه، تأثيره على العشب الضار، تحلله التدريجي[2].

2.1.3.I. مبيدات الفطريات

تقسم إلى مبيدات عضوية وأخرى غير عضوية، حيث تحتوي العديد من المركبات الفعالة على الفطريات والنشطة على البكتيريا و الفيروسات، تستعمل على البذور، التربة، النباتات وكذلك على المحاصيل الزراعية، وفي أغذية المواشي وبالتساوي مع ذلك في الحفاظ على أماكن التخزين للمواد الغذائية وأماكن تربية الحيوانات[2].

3.1.3.I. مبيدات الحشرات

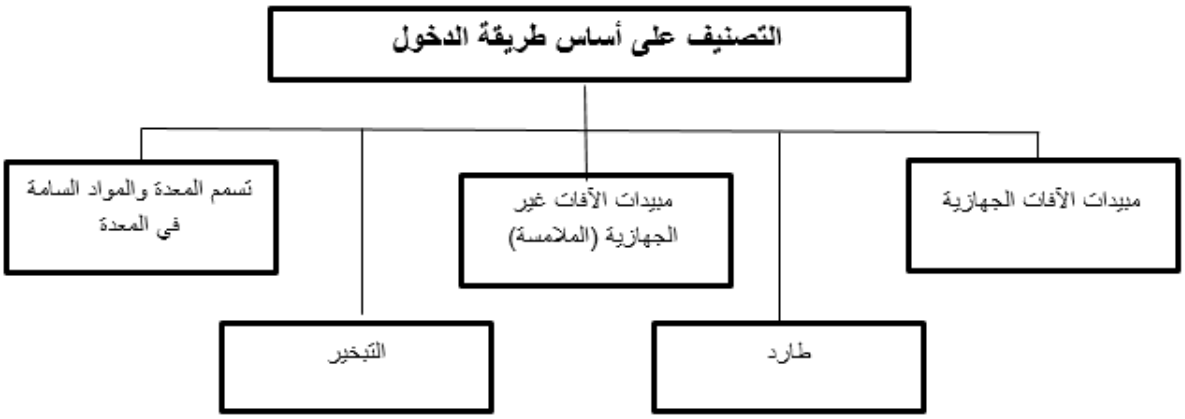
تعتبر الأكثر استعمالا من طرف المزارعين لإيجابياتها الكثيرة، لكن الاستعمال المفرط يؤثر سلبا على صحة الإنسان و الحيوان، تؤثر على الحشرات سواء عن طريق البلع، الامتصاص المعوي، عن طريق التلامس، الامتصاص عن طريق الجلد . تؤثر

مبيدات الحشرات تبعا لتركيبها الكيميائي على: الجهاز العصبي، التركيب الحيوي للكيتين، إنتاج الطاقة أو كذلك تمييه الحشرات، ويمكن كذلك أن تؤثر على الهرمونات التي تسمح بالاتصال بين الحشرات فيما بينها أو بين الحشرات والنباتات[2].

I.2.3. تصنيف الأكثر شيوعا

I.1.2.3. التصنيف على أساس طريقة الدخول

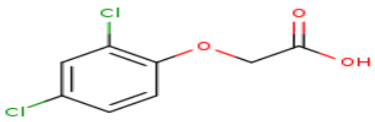
يتم استدعاء الطرق التي تتلامس بها مبيدات الآفات مع الهدف أو طرق الدخول. وتشمل هذه السموم الجهازية: الاتصال، المعدة، التبخير وطاردات[1].



الشكلI.1:رسم تخطيطي لتصنيف على أساس طريقة الدخول

I.1.1.2.3. مبيدات الآفات الجهازية

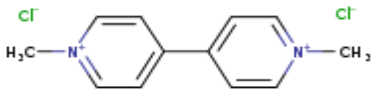
المبيدات الجهازية هي مبيدات حشرية تمتصها النباتات أو الحيوانات وينتقل إلى الأنسجة غير المعالجة. يتحرك مبيدات الأعشاب الجهازية إلى مناطق غير معالجة من الأوراق أو السيقان أو الجذور. يمكن بشكل فعال أن تخترق أنسجة النبات، وتتحرك من خلال نظام الأوعية الدموية للنبات قتل آفات معينة. يتم أيضًا استخدام بعض المبيدات الحشرية الجهازية وتتحرك من خلال الحيوانات للسيطرة على الآفات مثل اليرقات الحربية، أو القمل، أو البراغيث. وقد تكون حركة المبيدات في أنسجة النبات أحادية الاتجاه أو متعدد الاتجاهات. قد تتحرك بعض المبيدات في اتجاه واحد فقط، إما لأعلى أو أسفل داخل النبات. بينما قد تتحرك المبيدات الحشرية الأخرى لأعلى النباتات فقط. إذا تم تطبيقه على منطقة الجذر، فسوف ينتقل في جميع أنحاء النبات، ولكن إذا تطبق على الأوراق ولن تتحرك في جميع أنحاء النبات. حيث يعتبر عدد قليل من مبيدات الآفات نظاميًا محليًا ولا ينتقل إلا إلى فترة قصيرة المسافة في النبات من نقطة الإتصال. أمثلة على مبيدات الآفات الجهازية تشمل 2، 4-ثنائي كلورو فينوكسياسيتيك حمض وغليفوسات (2,4-Dichlorophenoxyacetic acid)**[5]**.



الشكل 2.I:المركب 2,4-Dichloro phenoxy acetic acid

2.1.2.3.I. مبيدات الآفات غير الجهازية (الملامسة)

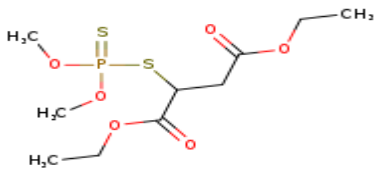
تسمى المبيدات غير الجهازية أيضًا مبيدات الآفات الملامسة لأنها تعمل على الهدف الآفات عندما تتلامس. يجب أن تدخل المبيدات فيزيائية الاتصال مع الآفة لتكون فعالة. المبيد يدخل جسم الآفات عن طريق بشرتهم عند الاتصال ويسبب الموت بالتسمم. لا تخترق المبيدات بالضرورة أنسجة النبات وبالتالي لا تنتقل عبر نظام الأوعية الدموية للنبات. أمثلة على الاتصال مبيدات الآفات هي باراكوات Paraquat وديكوات ثنائي بروميد[1].



الشكل.3.I :المركب Paraquat

3.1.2.3.I. مبيدات تسمم المعدة والمواد السامة في المعدة

يدخل مبيدات تسمم المعدة إلى جسم الآفة عن طريق الفم والجهاز الهضمي، ويسبب الوفاة بالتسمم. سموم المعدة المكتسبة أثناء تغذية الآفات، عند تناول المبيدات الحشرية المطبقة فيها الأوراق وأجزاء أخرى من النبات. قد تدخل أيضًا مواد سامة في معدة جسم الحشرات عن طريق الفم والجهاز الهضمي؛ حيث يمتصها إلى جسم الحشرة. هذا أكثر ملائمة خاصة في ناقلات بما في ذلك البكتيريا، أو سمومها المطبقة على المياه؛ حيث التغذية بترشيح البعوض أو يرقات الذباب الأسود سوف تأكل السم؛ حيث تقتل المبيدات الحشرية النواقل عن طريق تدمير الأمعاء الوسطى أو معدة اليرقات. مثال: الملاثيون Malathion[1].



الشكل.4.I: المركب Malathion

I.4.1.2.3. مبيدات التبخير

التبخير هو مبيدات الآفات التي تعمل أو قد تقتل الآفات المستهدفة عن طريق إنتاج البخار. تشكل هذه المبيدات غازات سامة عند تطبيقها؛ حيث تدخل المبيدات الحشرية في شكل بخار إلى جسم الآفات عبر نظام القصبة الهوائية (الجهاز التنفسي) عن طريق الفتحات ويسبب الموت بالتسمم. بعض من المكونات النشطة هي سوائل عند تعبئتها تحت ضغط عالٍ ولكنها تتغير للغازات عند إطلاقها. المكونات النشطة الأخرى هي السوائل المتطايرة عند وضعها في حاوية عادية وعدم وضعها تحت ضغط. تستخدم مواد التبخير لإزالة آفات المنتجات المخزنة من الفواكه والخضروات والحبوب، كما أنها مفيدة جدًا في مكافحة الآفات الموجودة في التربة[1].

I.5.1.2.3. طارد

لا تقتل المواد الطاردة للحشرات، ولكنها لها القدرة بما يكفي لإبعاد الآفات عن معالجة المناطق / السلع، كما أنها تتعارض مع قدرة الآفات على تحديد مكان المحاصيل[1].

I.2.2.3. التصنيف على أساس وظيفة المبيدات والآفات

الكائن الحي يقتل بموجب هذه الطريقة، يتم تصنيف مبيدات الآفات على أساس كائن الآفة المستهدفة وأسماء المبيدات محددة لتعكس نشاطها. تنشأ مجموعة أسماء هذه المبيدات من الكلمة اللاتينية cide بمعنى قتل، أو التي تُستخدم كلاحقة بعد الاسم المقابل للآفات التي تقتلها[1].

الجدول1.I: تصنيف مبيدات الآفات المستهدفة[6]

نوع الآفات	الهدف الآفات / الوظيفة	أمثلة
Insecticides	Kill insects and other arthropods	Aldicarb
Fungicides	Kill fungi (including blights, mildews, molds, and rusts)	Azoxystrobin
Bactericides	Kill bacteria or acts against bacteria	Copper complexes
Herbicides	Kill weeds and other plants that grow wherethey are not wanted	Atrazine
Acaricides	Kill mites that feed on plants and animals	Bifenazate
Rodenticides	Control mice and other rodents	Warfarin
Algaecides	Control or kill growth of algae	Copper sulfate
Larvicides	Inhibits growth of larvae	Methoprene
Repellents	Repel pests by its taste or smell	Methiocarb
Desiccants	Act on plants by drying their tissues	Boric acid
Ovicides	Inhibits the growth of eggs of insects and mites	Benzoxazin
Virucides	Acts against viruses	Scytovirin
Molluscicides	Inhibit or kill mollusc's *i.e.* snail's usually disturbing growth of plants or crops	Metaldehyde
Nematicides	Kill nematodes that act as parasites of plants	Aldicarb
Avicides	Kill birds	Avitrol
Moth balls	Stop any damage to cloths by moth larvae or molds	Dichlorobenzene
Lampricides	Target larvae of lampreys which are jawless fish like vertebrates in the river	Trifluromethyl Nitrophenol
Piscicides	Act against fishes	Rotenone
Silvicides	Acts against woody vegetation	Tebuthiuron
Termiticides	Kills termites	Fipronil

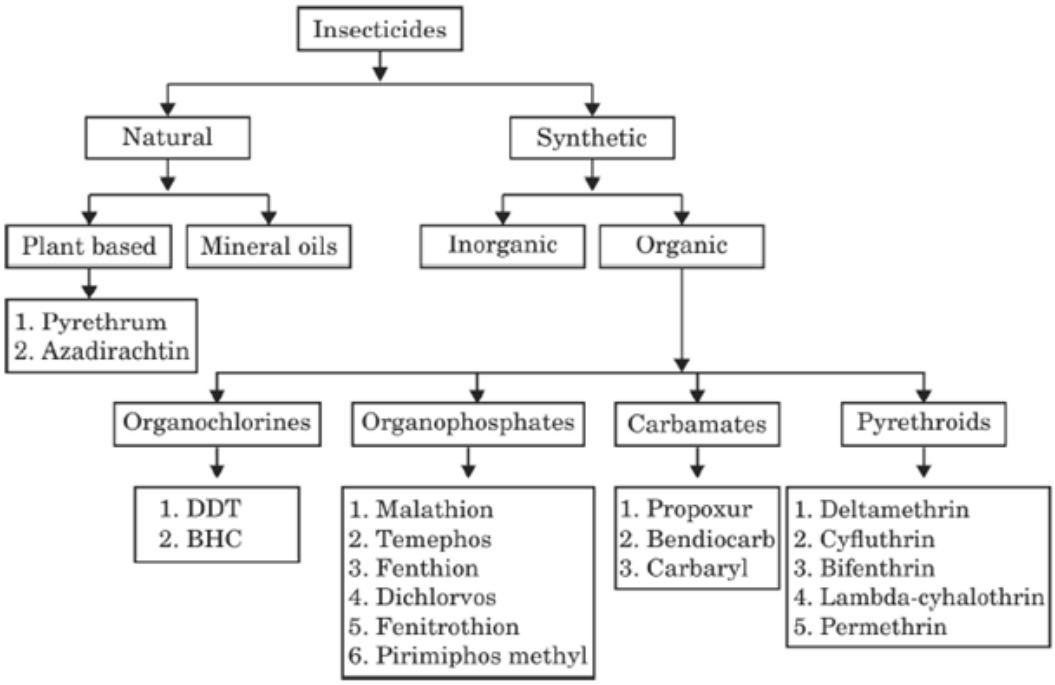
بعض المبيدات يتم تصنيفها أيضًا وفقًا لوظيفتها، على سبيل المثال: المسقطات التي تسبب النباتات في اسقاط أوراقها، المجففات، والتي تسرع من تجفيف نباتات الحصاد الميكانيكي أو تسبب جفاف الحشرات وموتها، طارد الذي يصد الآفات، الجاذبات، التي تجذب الآفات عادة إلى المصيدة، والمعززات الكيماوية التي تعقم الآفات، كما أن هناك مبيدات لمكافحة أكثر من فئة من الآفات ويمكن إعتباره في أكثر من فئة من المبيدات، وهو واسع الانتشار تستخدم في إنتاج الحمضيات في فلوريدا، ويمكن اعتبارها مبيد حشرات، أو مبيد النيماتودا لأنه يتحكم في العث والحشرات والديدان الخيطية على التوالي[1].

مثال شائع هو 2،D-4،والذي يستخدم كمبيد للأعشاب لمكافحة الحشائش عريضة الأوراق، ولكنه منظم لنمو النبات بمعدلات منخفضة. الجاذبات والمواد الطاردة للحشرات تعتبر مبيدات حشرية بسبب استخدامها في مكافحة الآفات[1].

3.2.3.I. التصنيف على أساس التركيب الكيميائي لمبيدات الآفات

تعتمد الطريقة الأكثر شيوعًا وفائدة في تصنيف المبيدات على تركيبها الكيميائي وطبيعة المكونات النشطة. إنه مثل هذا النوع التصنيف الذي يعطي فكرة عن الفعالية والفيزيائية والكيميائية خصائص مبيدات الآفات المعنية. المعلومات عن المواد الكيميائية

و الخصائص الفيزيائية لمبيدات الآفات مفيدة جدا في تحديد الوضع من التطبيق والاحتياطات التي يجب اتخاذها أثناء التطبيق ومعدلات التطبيق. مبيدات الآفات مصنفة على أساس التركيب الكيميائي في أربع مجموعات رئيسية هي: الكلورين العضوي، الفوسفور العضوي، الكرباميات والبيرثرين والبيرثرويدات. تصنيف المادة الكيميائية مبيدات الآفات معقد نوعًا ما بشكل عام. المبيدات الحديثة هي مواد كيميائية عضوية، وهي تشمل مبيدات الآفات الاصطناعية والنباتية الأصل، ومع ذلك فإن بعض المركبات غير العضوية تستخدم أيضًا كمبيدات للآفات. المبيدات الحشرية هي مبيدات الآفات الهامة التي يمكن تصنيفها بشكل أكبر عدة فئات فرعية. يرد التصنيف الفرعي للمبيدات الحشرية[5].



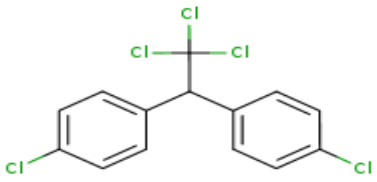
الشكلI.5: رسم تخطيطي لتصنيف المبيدات الحشرية[1].

I.3.2.3.1. كلور عضوي

مبيدات الآفات الكلورية العضوية (المعروفة أيضًا باسم الهيدروكربونات الكلورة) هي مركبات عضوية مرتبطة بخمس ذرات كلور أو أكثر. إنها تمثل المجموعة الأولى من مبيدات الآفات التي تم تصنيعها واستخدامها على نطاق في الزراعة والصحة العامة. تم استخدام معظمهم على نطاق واسع مبيدات حشرية لمكافحة مجموعة واسعة من الحشرات، ولها مدى طويل التأثير المتبقي في البيئة. هذه المبيدات الحشرية قد تعطل الجهاز العصبي للحشرات يؤدي إلى تشنجات وشلل تليها الموت في نهاية المطاف. الأمثلة الأكثر شيوعًا لهذه المبيدات[1].

يشمل: dichloro diphenyl trichloro ethane(DDT)، الليندين Lindane، الإندوسلفان Endosulfan ، الألدرين Aldrin، الديلدرين Dieldrin، الكلوردان Chlordane، رغم ذلك، تم حظر إنتاج وتطبيق الـ DDT في معظم البلدان المتقدمة

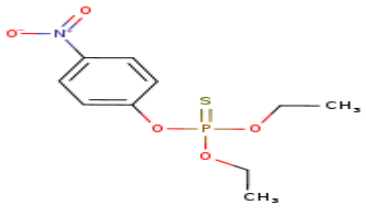
دول بما في ذلك الولايات المتحدة منذ سنوات عديدة، لا يزال يتم استخدامه في معظم البلدان النامية الإستوائية لمكافحة ناقلات الأمراض (ولا سيما أين يحدث الملاريا)[1].



الشكل I.6: المركب DDT

I.2.3.2.3. الفوسفات العضوي

تعتبر مبيدات الفوسفات العضوية واحدة من الطيف الواسع مبيدات الآفات التي تكافح مجموعة واسعة من الآفات بسبب وظائفها المتعددة، وهي تتميز بسموم المعدة، والسموم الملامسة والتبخير السم يؤدي إلى السموم العصبية، هذه المبيدات الحشرية قابلة للتحلل أيضًا، تسبب الحد الأدنى من التلوث البيئي ومقاومة الآفات البطيئة. المبيدات الحشرية الفسفورية أكثر سمية للفقاريات و اللافقاريات مثبطات الكولينستريز(Cholinesterase inihibitor)مما يؤدي إلى تراكب دائم من الناقل العصبي أستيل كولين عبر المشبك. نتيجة لذلك، النبضات عصبي تفشل في التحرك عبر المشبك مما يؤدي إلى ارتعاش سريع في العضلات الإرادية تؤدي بالتالي إلى الشلل والوفاة. بعد على نطاق واسع تشمل المبيدات الحشرية الفسفورية العضوية الباراثيون (Parathion)، الملاثيون (Malathion)، الديازنون (Diazinon) والجليفوسات (Glyphosate)[1].



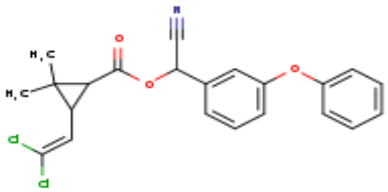
الشكل I.7: المركب Parathion

I.3.3.2.3. الكربامات

من الناحية الهيكلية، تتشابه الكربامات مع الفوسفات العضوي، ومع ذلك من حيث أصل الفوسفات العضوي، مشتقات حمض الفوسفوريك، بينما مشتق الكربامات من حمض الكربامك. مبيدات الآفات الكربامات تشبه مبيدات الفوسفات العضوي من خلال التأثير، نقل الإشارات العصبية التي تؤدي إلى موت آفة التسمم. في بعض الأحيان يتم استخدامها أيضًا كسموم للمعدة والاتصال وكذلك المبخرة. يمكن أن تتحلل بسهولة في ظل البيئة الطبيعية مع الحد الأدنى من التلوث البيئي[1].

4.3.2.3.I.البيريثرويدات الاصطناعية

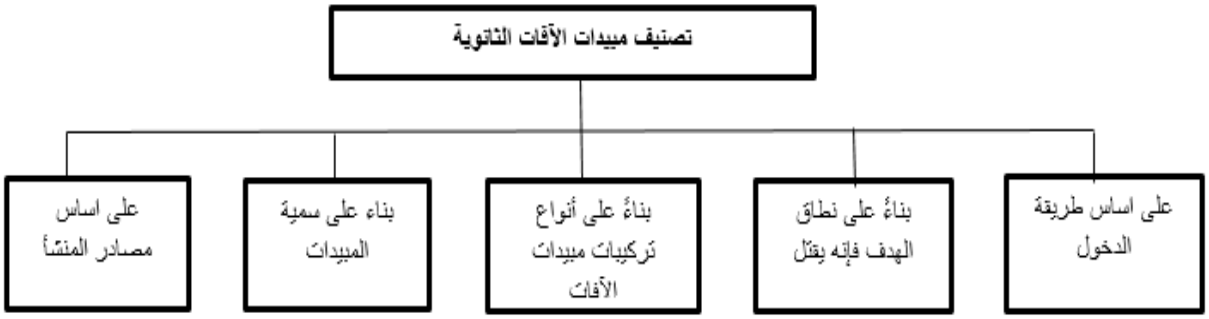
مبيدات الآفات البيرثرويد (Pyrethroid) الاصطناعية: هي مجموعة من المبيدات العضوية التي يمكن أن تكون تم تصنيعها عن طريق تكرار بنية البيرثرينات الطبيعية نسبيا، فهي أكثر ثباتًا ولها آثار متبقية أطول من البيرثرينات (Pyrethrins)الطبيعية. يتم طحن البيرثرينات لإنتاج مكونات نشطة. معظم المبيدات الحشرية الاصطناعية غير ثابتة ، وتتعرض للكسر بسهولة عند التعرض للضوء. تعتبر من أكثر المبيدات الحشرية أمانًا للاستخدام في الغذاء. سايبرمثرين (Cypermethrin) وبيرميثرين (Permethrin) هما أكثر أنواع البيرثرويد الاصطناعية استخدامًا مبيدات حشرية[1].



الشكل8.I: المركب Cypermethrin

4.I. أصناف مبيدات الآفات الثانوية الأخرى

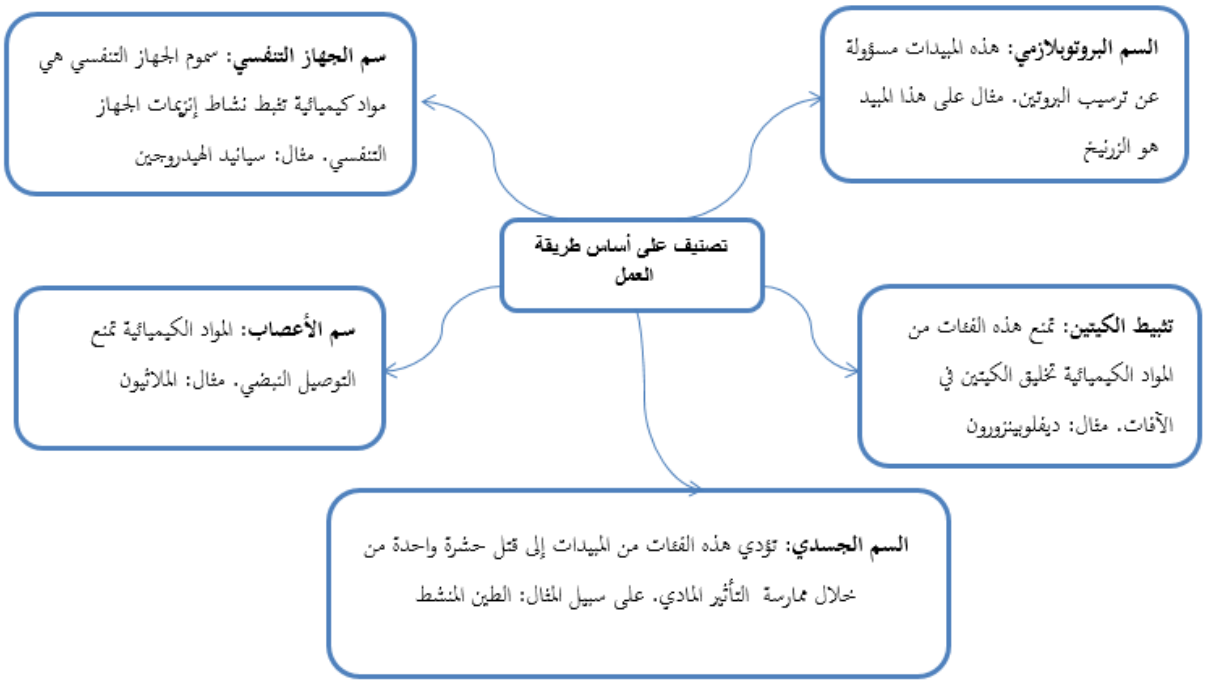
و تتم تصنيف مبيدات الثانوية إلى تصنيفين على أساس طريقة الدخول و على أساس مصادر المنشأ



الشكل9.I. : رسم تخطيطي لتصنيف مبيدات الآفات الثانوية

1.4.I.التصنيف على أساس طريقة العمل

بناءً على طريقة العمل، يتم تصنيف مبيدات الآفات[1] على النحو التالي



الشكل10.I:رسم تخطيطي لتصنيف على أساس طريقة العمل

2.4.I. التصنيف على أساس مصادر المنشأ

المبيدات: هي مادة كيميائية أو بيولوجية تهدف إلى تدمير الآفات أو منع الضرر الناجم عن الآفات، بناءً على مصادر المنشأ، يمكن تصنيف مبيدات الآفات إلى مبيدات آفات كيميائية ومبيدات حيوية يعملون على الآفة المستهدفة فقط والكائنات الحية المرتبطة بقوة، بينما كيميائية عادة ما تكون مبيدات الآفات واسعة النطاق مما يؤثر على مجموعة كبيرة من غير الهدف الكائنات الحية. عادة ما تكون المبيدات الحيوية صديقة للبيئة ، كما هي أقل المواد الكيميائية سمية، تتحلل بسهولة ومطلوبة بكميات صغيرة[1].

تسبب المبيدات الحشرية تلوثًا بيئيًا كبيرًا لأنها سامة جدًا وليست دائما قابلة للتحلل، ميزة أخرى هامة لاستخدام المبيدات الحيوية هي حقيقة أنهم أقل عرضة للتعديل الجيني في نبات السكان، وهذا يؤكد ضعف فرصة مقاومة الآفات لمبيدات الآفات، والتي لا تكاد تظهر في حالة المبيدات الكيماوية المبيدات الكيماوية ينقسم كذلك إلى: الكلور العضوي، الفوسفات العضوي، الكربامات، المبيدات الحيوية مجموعة المبيدات المشتقة من مواد طبيعية كالحيوانات والنباتات والكائنات الحية الدقيقة (البكتيريا والفيروسات والفطريات والنيماتودا)، هم أنهم مصنفة إلى ثلاث مجموعات[1].

الشكلI.11: رسم تخطيطي لتصنيف على أساس مصادر المنشأ

I.2.4.1. المبيدات الميكروبية

العنصر النشط في مبيدات الآفات الميكروبية: هو الكائنات الحية الدقيقة مثل البكتيريا والفطريات أو البروتوزوان Protozoa. تقتل هذه المبيدات الحشرات إما بالسموم التي تطلقها الكائنات الميكروبية، أكثر مبيدات الآفات شيوعًا التي تدخل في نطاق هذه المجموعة تشمل البكتيريا السم الذي تنتجه، Bacillus thuringiensis (Bti) والبكتيريا الحية Bacillus. طريقة العمل بشكل عام هي إنتاج بروتين يرتبط بمستقبلات الأمعاء اليرقية التي تجوع اليرقات. هذان النوعان من البكتيريا تستخدم السموم ضد يرقات البعوض ويرقات الذباب الأسود. معظم الميكروبات مبيدات الآفات أكثر انتقائية من مبيدات الآفات الكيميائية الحيوية[1].

I.2.4.2. الواقيات النباتية المدمجة

هذه المجموعات من المبيدات تنتجها النباتات بشكل طبيعي، أيضا الجين ضروري لإنتاج مبيدات النبات من خلال الهندسة الوراثية. ومن ثم فإن المبيدات التي تنتجها هذه النباتات ويتم تعريف المادة الوراثية المدخلة معًا على أنها نباتية مدمجة الحافظات[1].

I.2.4.3. مبيدات الآفات البيوكيميائية

الصنف الثالث هو مبيدات كيميائية حيوية وتشمل مواد طبيعية التي لديها غير سام آليات السيطرة على الآفات، أمثلة على الكيمياء الحيوية المبيدات الحشرية هي هرمونات جنس الحشرات (تعمل بالتدخل في التزاوج) ، وهي مجموعة المستخلصات النباتية العطرية (العمل عن طريق جذب الآفات الحشرية إلى المصائد)[1].

I.2.4. بناءً على نطاق الهدف فإنه يقتل

بموجب طريقة التصنيف هذه، يتم تصنيف مبيدات الآفات إلى مجموعتين كمبيدات آفات واسعة النطاق ومبيدات آفات انتقائية. مبيدات الآفات هي تلك المبيدات التي تهدف إلى قتل مجموعة واسعة من الآفات وغيرها من الكائنات الحية غير المستهدفة. فهي غير انتقائية وغالبًا ما تكون قاتلة للزواحف والأسماك والحيوانات الأليفة والطيور. بعض الأمثلة على مبيدات الآفات واسعة

النطاق هي الكلور بيريفوس والكلوردان. المبيدات الانتقائية من ناحية أخرى تلك المبيدات التي تقتل فقط مجموعة معينة أو مجموعة من الآفات التي تترك أخرى الكائنات الحية غير متأثرة أو ذات تأثير ضئيل[1].

I.4.4. بناءً على أنواع تركيبات مبيدات الآفات

تركيبات مبيدات الآفات عبارة عن خليط من المادة الفعالة وخامل مكونات. المكونات النشطة هي مواد كيميائية تهدف إلى التحكم في الهدف الآفات، بينما عنصر خامل (مثل الماء، مذيب البترول، ترطيب العوامل، الموزعات، الملصقات، الموسعات) هي المواد المضافة إلى الذكاء الاصطناعي جعل المبيدات أكثر أمانًا وفعالية وأسهل في القياس والخلط والتطبيق. كما أنها أكثر ملائمة في التعامل معها. قد تكون مجموعة واحدة من المبيدات مختلطة مع مجموعة أخرى من غير المبيدات ، أو استخدامها مجتمعة لإنتاج مثل هذه المبيدات. يتم الجمع بين مجموعة واحدة من المبيدات ومجموعة أخرى من مبيدات الآفات بطريقة تزيد من فاعلية مبيد واحد وسيوفر حماية أفضل ضد مركب مبيد واحد، أيضا أنها قادرة على السيطرة على مبيدات الآفات المتعددة في جرعة واحدة من التطبيق. يمكن تقسيم تركيبات مبيدات الآفات إلى ثلاثة أنواع رئيسية: المواد الصلبة والسوائل أو الغازات. بعض التركيبات جاهزة للاستخدام بينما يحتاج البعض الآخر إلى المزيد التخفيف بالماء أو المذيب البترولي أو الهواء كما هو الحال في الهواء أو (ULV) قبل تطبيقها. الأكثر شيوعا يتم سرد التركيبات تحت العناوين[1] التالية:

الشكلI.12: رسم تخطيطي لأنواع تركيبات مبيدات الآفات

I.4.4.1. السوائل

تتكون هذه التركيبات من محاليل زيتية مركزة من الدرجة التقنية مبيدات الآفات مع مستحلب مضاف للسماح بمزيد من الاختلاط مع ماء. المستحلبات هي مواد تشبه المنظفات تسمح بالتعليق قطرات زيت صغيرة جدًا في الماء لتكوين مستحلب. مستحلب تستخدم المركزات مع تخفيف الماء على نطاق واسع لمكافحة ناقلات الأمراض.

I.4.4.2. مساحيق

هذه المساحيق القابلة للتشتت مطحونة بدقة، مساحيق جافة تتكون من مكونات المبيدات النشطة ممزوجة بمكونات أخرى للمساعدة في الخلط والتشتت. وهي من نوعين: مسحوق قابل للبلل وقابل للذوبان؛ قابل للبلل تم تصميم المساحيق للخلط مع سائل، عادة الماء للتطبيق بواسطة معدات الرش. يتم خلطها بشكل عام بالماء لتشكيل ملاط قبل إضافتها إلى خزان الرش، حيث تتطلب التقليب المستمر. يمكن استخدام الفسفور الأبيض في معظم مشاكل الآفات وفي معظم معدات الرش، متاح في شكل مساحيق قابلة للذوبان.

I.4.4.3. حبيبات

تحت هذه الصيغة، يتم خلط العنصر النشط مع حامل مختلف لتشكيل جزيئات بأحجام مختلفة. حجم الحبيبات المستخدمة في النواقل يتراوح التحكم عادة من 20 إلى 80 شبكة. التركيبات الحبيبية معدة للتطبيق المباشر وتتطلب معدات تشتيت متخصصة. يمكن تطبيقها من الجو أو على الأرض. يمكن استخدامها مع وحدات صغيرة مرفوعة يدويًا، أو مبعثرة يدويًا (مع الحماية الشخصية). التطبيقات الحبيبية لمبيدات الآفات مفيدة بشكل خاص في معالجة يرقات البعوض في الأماكن التي يكون فيها الغطاء النباتي كثيفًا خلاف ذلك منع المبيدات الحشرية من الوصول إلى الماء.

I.4.4.4. الطعوم

تحتوي الطعوم على مكونات نشطة مختلطة مع غذاء الآفات أو الجاذب. تشمل الاستخدامات الرئيسية للطعم مكافحة الآفات المنزلية مثل النمل، الفئران والجرذان والصراصير والذباب, كما أنها تستخدم في الهواء الطلق للسيطرة على الطيور، النمل والرخويات والقواقع والآفات الزراعية مثل الصراصير والجنادب.

I.4.4.5. تراب

تركيبات مبيدات الغبار عبارة عن مخاليط مطحونة من المكونات الفعالة ومادة حاملة. تركيبات الغبار مخصصة للتطبيق المباشر بدون مزيد من الخلط. لا يُقترح استخدام الغبار عندما يكون الانجراف مشكلة محتملة. لهذا السبب، لا تتم صياغة مبيدات الأعشاب على شكل غبار في مكافحة ناقلات الأمراض، غالبًا ما يستخدم الغبار للسيطرة على البراغيث والطفيليات البيئية الأخرى على الحيوانات الأليفة. كما يتم تطبيقها أيضًا على جحور القوارض ومحطات الطعم للسيطرة على البراغيث في عمليات مكافحة الطاعون.

I.4.4.6. سائل منخفض الحجم للغاية

تُباع مركّزات الحجم المنخفض للغاية (ULV) كمنتج تقني بداخلها سائل أصلي، أو منتج صلب مذاب في كمية صغيرة من المذيب. قد تقترب هذه المركزات من المكون النشط 100٪. تم تصميمها لاستخدامها كما هي أو للتخفيف بكميات صغيرة فقط. تستخدم هذه التركيبات ذات الأغراض الخاصة في الزراعة، برامج مكافحة الزينة والبعوض. قطرات أكبر تعتبر غير فعالة ومهدرة

ويمكن أن تكون لها بيئة غير مرغوب فيها. ومع ذلك، فإن تطبيقاتULV، عندما يتم إجراؤها بشكل صحيح، تكون فعالة للغاية وآمن جدًا للناس والكائنات الحية الأخرى غير المستهدفة.

I.5.4. بناء على سمية المبيدات

اعتمادًا على المخاطر الصحية المرتبطة بالمبيدات والسلوك السام المبيدات. صنفتهم منظمة الصحة العالمية (WHO)إلى أربع فئات. أجرت منظمة الصحة العالمية تجربة على الفئران وغيرها من حيوانات المختبر بإعطاء جرعة من المبيدات عن طريق الفم والجلد. ثم قاموا بتقدير متوسط الجرعة المميتة(LD_{50}) التي تسبب الوفاة في 50% من الحيوانات المعرضة للوصول إلى هذا الاستنتاج. فئة الترتيب من الأقل إلى الأعلى سمية في الأرقام من الأول إلى الرابع تشير إلى شديدة السمية، شديد السمية، متوسط السمية، قليل السمية[7]، على التوالي.

الجدول2.I: تصنيف مستوى السمية لـWHO[8].

أمثلة	للفئران LD_{50} (mg/kg)		مستوى السمية	فئة WHO
	عن طريق الفم	جلدي		
Parathion, Dieldrin Eldrin, Dichlorvos DDT, Chlordane Malathion Carbetamide, Cycloprothrin	<5 5–50 50–2000 >2000 ≥ 5000	<50 50–200 200–2000 >2000	Extremely hazardous Highly hazardous Moderately hazardous Slightly hazardous Unlikely to present acute hazard in normal use	Class Ia Class Ib Class II Class III Class IV

I.5. أنواع السمية

المبيدات هي سموم وأكثرها سموم عصبية مثل مجاميع المبيدات الفسفورية والكرباماتية، ويتوقف تأثير المبيد على عدد من العوامل أهمها: العلاقة بين الجرعة والوقت؛ أي الكمية التي يتعرض لها الكائن الحي وارتباطها بفترة التعرض أو تكرار الجرعة[2].

I.5.1. السمية الحادة

هي التأثير الضار الذي يحد للكائن الحي بعد التعرض للمبيد لفترة قصيرة ولمرة واحدة أو مرات متعددة خلال فترة قصيرة، تجرى دراسات السمية الحادة للحصول على معلومات للآثار السلبية للمبيدات، التي يمكن أن تظهر على الكائن الحي خلال أسبوعين من التعرض لجرعات عالية من المبيد. تفرض الوكالة العالمية لمكافحة الآفات ستة أنواع من دراسات السمية الحادة لتسويق حاضر تجاري يحتوي: مادة فعالة عن طريق الجلد، الاستنشاق، عن طريق الفم، تهيج أولي للعين، تهيج أولي للجلد وحساسية للبشرة. تُعطى السمية الحادة الجلدية، التنفسية والفموية عن طريق LC_{50} وهي التركيز أو الجرعة، التي تقتل % 50 من مجموعة الحيوانات المعاملة[9].

2.5.I. السمية المزمنة

تحدث السمية المزمنة عادة عند الامتصاص المزمن للمبيد خلال عدة أيام، عدة شهور أو عدة سنوات بجرعات منخفضة أو قد تكون نتيجة للتسمم الحاد المتكرر. تتطور الآثار على مدة زمنية طويلة وتستطيع أن تستمر لعدة سنوات بعد التعرض الأولي لها. التعرض المزمن للمبيدات يهدد صحة الإنسان وقد يتسبب في: السرطان، اضطراب في نمو الأجنة، خلل في الجهاز العصبي، التناسلي والهرموني[9].

6.I. تصنيف السمية

طرق التعرض الكائن الحي للجرعة يكون عن طريق الفم، الجلد والاستنشاق، يمكن أن تكون السمية إما حادة أو مزمنة. وأكثر شيوعا واستخداما هو تصنيف المنظمات العالمية[10].

1.6.I. تصنيف منظمة الصحة العالمية (WHO) للسمية الحادة لمبيدات الآفات

تم تصنيف السمية الحادة للمبيدات حسب منظمة الصحة العالمية (WHO)[10]، حسب الجدول الاتية:

الجدول3.I: تصنيف السمية الحادة لمبيدات الآفات حسب منظمة الصحة العالمية (WHO)

تصنيف	خطر	للفئران LD_{50} (mg/kg)			
		شفوي		جلدي	
		مواد صلبة	السوائل	مواد صلبة	السوائل
Ia	Extreme	≤5	≤20	≤10	≤40
Ib	Highl	5-50	20-200	10-100	40-400
II	Moderate	50-500	200-2000	100-1000	400-4000
III	Slight	≥501	≥2001	≥1001	≥4000

2.6.I. تصنيف وكالة حماية البيئة (EPA)، الولايات المتحدة الأمريكي(USA)

تم تصنيف السمية الحادة للمبيدات الآفات، حسب وكالة حماية البيئة (EPA) لـ (USA)[10].

1.2.6.I. المبيدات الآفات السمية الحادة

الجدول4.I: تصنيف السمية الحادة لمبيدات الآفات حسب وكالة حماية البيئة (EPA)

تصنيف	سمية الفئران الحادة		
	عن طريق الفم LD_{50}(mg/kg)	عن طريق الجلد LD_{50}(mg/kg)	عن طريق الاستنشاق LC_{50}(mg/l)
I	≤50	≤200	≤0.2
II	50-500	200-2000	0.2-2.0
III	500-5000	2000-20,000	2.0-20
IV	≥5000	≥20,000	≥20

2.2.6.I. المبيدات الآفات الجلدية وتهيج العين

أيضا تم تصنيف السمية حسب الآثار البصرية والآثار الجلدية[10].

الجدول 5.I: تصنيف السمية المبيدات حسب تأثير بصري و جلدي ل (EPA)

تصنيف	تأثيرات بصرية	أثار الجلدية
I	تأكل القرينة عتامة لا رجعة فيها	تأكل
II	عتامة القرنية قابلة للانعكاس في 7 أيام تهيج مستمر لمدة 7 أيام	تهيج عند 72 ساعة
III	عتامة القرنية قابلة للانعكاس في 7 أيام تهيج مستمر لمدة 7 أيام	تهيج متعدل في 7ساعة
IV	لا تهيج	تهيج خفيف أو خفيف عند 72ساعة

7.I. تأثير المبيدات

بالرغم من النتائج المفيدة لاستخدام المبيدات في الزراعة والصحة العامة القطاع، فإن استخدامها يستدعي أيضًا البيئة والصحة العامة الضارة تأثيرات. مبيدات الآفات تحتل مكانة فريدة بين الملوثات البيئية بسبب نشاطها البيولوجي العالي وسميتها. معظم المبيدات لا تفعل ذلك يميز بين الآفات وأشكال الحياة العارضة الأخرى المماثلة. حتى أنهم يحتمل أن تكون ضارة للإنسان والحيوان والكائنات الحية الأخرى و البيئة إذا تم استخدامها بشكل غير صحيح. تشير التقديرات إلى أن حوالي 5000-20.000شخص ماتوا وحوالي 500000 إلى مليون شخص يتعرضون للتسمم كل عام عن طريق المبيدات. ما لا يقل عن نصف المخمورين 75%ممن يموتون بسبب المبيدات عمال الزراعة. يتم تسميم الباقي بسبب تناول الطعام الملوث[11].

1.7.I. التأثير المحتمل على صحة الإنسان

قد تدخل المبيدات إلى جسم الإنسان عن طريق استنشاق هواء ملوث. الغبار والبخار الذي يحتوي على مبيدات الآفات؛ من خلال التعرض عن طريق الفم عن طريق الاستهلاك الغذاء والمياه الملوثة؛ ومن خلال التعرض الجلدي عن طريق الاتصال المباشر بالمبيدات. يتم رش المبيدات على الطعام، وخاصة الفواكه والخضار، تفرز في التربة والمياه الجوفية التي يمكن أن تنتهي يمكن لمياه الشرب ورذاذ المبيدات أن تنجرف وتلوث الهواء. سمية المواد الكيميائية وطول وحجم التعرض تحدد درجة التأثير الضار على صحة الإنسان. سمية المواد الكيميائية تعتمد على طبيعة المادة السامة، طرق التعرض الجرعة والكائن الحي (عن طريق الفم، الجلد والاستنشاق)[12].

1.1.7.I. تأثير حاد

الآثار الضارة التي تحدث من التعرض الفردي بأي طريق دخول تسمى "التأثيرات الحادة". طرق التعرض الأربعة هي الجلد، الاستنشاق (الرئتين)، الفم والعينين. انجراف المبيدات عن الحقول الزراعية والتعرض للمبيدات أثناء التطبيق والتسمم المتعمد أو غير

المتعمد يؤدي عمومًا للمرض الحاد في البشر. عدة أعراض مثل الصداع، أوجاع الجسم، طفح جلدي، ضعف التركيز، غثيان، دوار، ضعف يمكن أن يحدث تشنجات في الرؤية، ونوبات هلع، وفي الحالات الشديدة الغيبوبة والموت تحدث بسبب التسمم بمبيدات الآفات. حوالي 3 ملايين حالة حادة يتم الإبلاغ عن التسمم بسبب مبيدات الآفات في جميع أنحاء العالم كل عام، 2مليون حالة محاولات انتحار وما تبقى من هذه الحالات هي حالات التسمم المهني أو العرضي[1].

2.1.7.I. التأثير المزمن

أي آثار ضارة تحدث من جرعات صغيرة تتكرر على مدى فترة الوقت يسمى "الآثار المزمنة". الآثار المزمنة المشتبه بها من التعرض لبعض مبيدات الآفات: العيوب الخلقية والسمية للجنين، إنتاج الأورام الحميدة أو الخبيثة، التغيرات الجينية، اضطرابات الدم، الأعصاب اضطرابات الغدد الصماء وتأثيرات التكاثر. الأعراض ليست كذلك لا تلاحظ على الفور لكنها تظهر في مرحلة لاحقة. أكثر شيوعا، المزارعون معرضون لخطر أكبر للتأثر. ومع ذلك، هناك فرص متساوية لعامة السكان للتأثر أيضًا بشكل خاص بسبب تسرب الأغذية والمياه الملوثة أو المبيدات من الحقول. تم حديثا أثبتت العديد من الدراسات وجود صلة بين التعرض لمبيدات الآفات وحالات الإصابة بالأمراض المزمنة البشرية التي تصيب الجهاز العصبي، والتناسلية، والكلى، الجهاز القلبي الوعائي والجهاز التنفسي بعض من الأكثر شيوعا الأمراض المزمنة الناتجة عن التعرض الطويل لمبيدات الآفات[1].

2.7.I. التأثيرات على البيئة

تقدم المؤسسات وعامة الجمهور العديد من المصادر المحتملة للمبيدات في البيئة، حيث نجد التطبيق المكثف والتخلص اللاحق من مبيدات الآفات من قبل المزارعين يكاد يكون من المستحيل تحديد مساحة تأثير المبيدات. حتى عندما يتم تطبيقه في منطقة صغيرة جدًا، فإنه ينتشر في الهواء، يمتص في التربة أو يذوب في الماء وفي النهاية تصل إلى مساحة أكبر بكثير. المبيدات بمجرد إطلاقها في البيئة يكون لها مصادر مختلفة مثل عند رش المبيدات في الزراعة محاصيل، قد تجد طريقها عبر الهواء وينتهي بها المطاف في أخرى أجزاء من البيئة، مثل التربة أو الماء. المبيدات الحشرية قد يتم غسلها مباشرة على التربة وتصل إلى السطح القريب المسطحات المائية من خلال الجريان السطحي أو قد تتسرب عبر التربة إلى طبقات التربة المنخفضة والمياه الجوفية، قد يتراوح آثار المبيدات على النظام البيئي من انحراف طفيف عن الوضع الطبيعي، أداء النظام البيئي لفقدان تنوع الأنواع في وقت ما قد يتسبب استخدام مبيدات الآفات في آثار متبقية طويلة المدى بينما تكون حادة بخلاف ذلك آثار قاتلة. على سبيل المثال، معظم المبيدات العضوية الكلورية ثابتة في البيئة لفترة طويلة، مما يؤدي إلى تلوث المياه الجوفية والمياه السطحية والمنتجات الغذائية والهواء والتربة[12].

1.2.7.I. التأثيرات على الكائن غير المستهدف

تم استخدام معظم المبيدات الحشرية لقتل الآفات؛ قد يكون أيضًا غير مستهدف بشكل سلبي الكائنات الحية مثل دودة الأرض والحيوانات المفترسة الطبيعية. ممكن أن تتسبب تطبيقات مبيدات الآفات في انخفاض أعداد ديدان الأرض. بالنسبة على سبيل المثال: المبيدات الحشرية الكرباماتية شديدة السمية لديدان الأرض وبعضها وقد أثبت أن الفوسفات العضوي يقلل من أعداد ديدان الأرض. للأسف، مفترس طبيعي مثل الطفيليات والحيوانات المفترسة (ضروري للسيطرة على مستوى تعداد الآفات) هم

الأكثر عرضة وتتأثر بشدة بالمبيدات الحشرية. تدمير هذه الطبيعية يمكن أن تؤدي الحيوانات المفترسة إلى تفاقم مشاكل الآفات عادة، إذا كان الأعداء الطبيعيون غائبين، مطلوب رش مبيدات حشرية إضافية للسيطرة على هدف الآفة. بالإضافة إلى ذلك، يمكن أن تؤثر مبيدات الآفات أيضًا على سلوك المفترس وسلوكه. معدل تاريخ الحياة بما في ذلك معدل النمو ووقت التطوير، ووظائف الإنجاب الأخرى. يمكن استخدام الملقحات مثل النحل وذباب الفاكهة وبعض الخنافس والطيور كمؤشرات حيوية لعمليات النظام البيئي من نواح كثيرة مثل: أنشطتها تتأثر بالإجهاد البيئي الناجم عن استخدام المبيدات و تعديلات الموائل. قد يؤدي استخدام مبيدات الآفات أيضًا إلى فقدان الحشرات بشكل مباشر الملقحات والخسارة غير المباشرة للمحاصيل بسبب عدم كفاية تجمعات الملقحات[1].

2.2.7.I. فقدان التنوع البيولوجي

غالبًا ما يُنظر إلى التنوع البيولوجي على أنه مقياس للتنوع البيولوجي الصحي الأنظمة. كلما زاد عدد الكائنات الحية التي تعيش في أرصدة البيئة، أكثر صحة تلك البيئة. بيئة متنوعة يحافظ على أنواع عديدة من أشكال الحياة التي تعتمد جميعها على بعضها البعض.هؤلاء قد تتراوح من الميكروبات إلى الحشرات مثل: النمل والخنافس والدبابير الطيور للحيوانات الكبيرة مثل: الفيل والحيوانات المفترسة مثل الثعالب، الذئاب والكلاب البرية والأسود والنمور والدببة. مثل هذا النظام لديه القدرة على الحفاظ على توازنها بحيث لا يصبح أي نوع مهيمن. بعض الأحيان، قد تكون الآفات مفيدة أيضًا للنظام البيولوجي من خلال الاستهلاك والتحكم آفات أخرى. لذلك القضاء حتى على الأنواع المفردة باستخدام المبيدات يمكن أن يسبب تغييرات كبيرة وقد يؤدي إلى العديد من التغييرات الأخرى أيضًا انقرضت في تلك البيئة. في بعض الحالات، قد يكون المبيد القضاء على الأنواع الأساسية لعمل المجتمع بأكمله، أو قد تعزز هيمنة الأنواع غير المرغوب فيها أو قد تتناقص ببساطة عدد وتنوع الأنواع الموجودة في المجتمع. هذا ممكن تعطل ديناميكيات شبكات الغذاء في المجتمع عن طريق كسر الروابط الغذائية القائمة بين الأنواع[1].

3.2.7.I. التأثيرات على النباتات الدقيقة في التربة

جزء كبير من المبيدات غير المستهدفة من التطبيقات الزراعية ومصادر أخرى قد تتراكم في التربة، علاوة على ذلك، فإن العشوائية ويؤدي الاستخدام المتكرر لمبيدات الآفات إلى تفاقم تراكم التربة. خصائص تربة وميكروفلورا التربة تتأثر بسبب المبيدات الحشرية التي قد يخضع لمجموعة متنوعة من التدهور والنقل والامتصاص / امتصاص العمليات. تتفاعل المبيدات المتدهورة مع التربة ومعها الكائنات الحية الدقيقة الأصلية، وبالتالي تتغير تنوعها الميكروبي، البيوكيميائية ردود الفعل والنشاط الأنزيمي. أي تغيير في التنوع الميكروبي والكتلة الحيوية للتربة تؤدي في النهاية إلى اضطراب النظام الإيكولوجي للتربة و فقدان خصوبة التربة. قد يؤدي استخدام مبيدات الآفات أيضًا إلى تثبيط أو قتل بعض مجموعة الكائنات الحية الدقيقة ويفوق عدد المجموعات الأخرى بإطلاقها من المنافسة، كما أنها قد تؤثر سلبًا على التربة الحيوية التفاعلات الكيميائية الحيوية بما في ذلك تثبيت النيتروجين، النترجة، وعن طريق تنشيط / تعطيل الكائنات الحية الدقيقة في التربة و/ أو الإنزيمات، كما تم الإبلاغ عن تأثير مبيدات الآفات تمعدن المادة العضوية في التربة، وهي خاصية أساسية للتربة يحدد جودة التربة وإنتاجيتها[1].

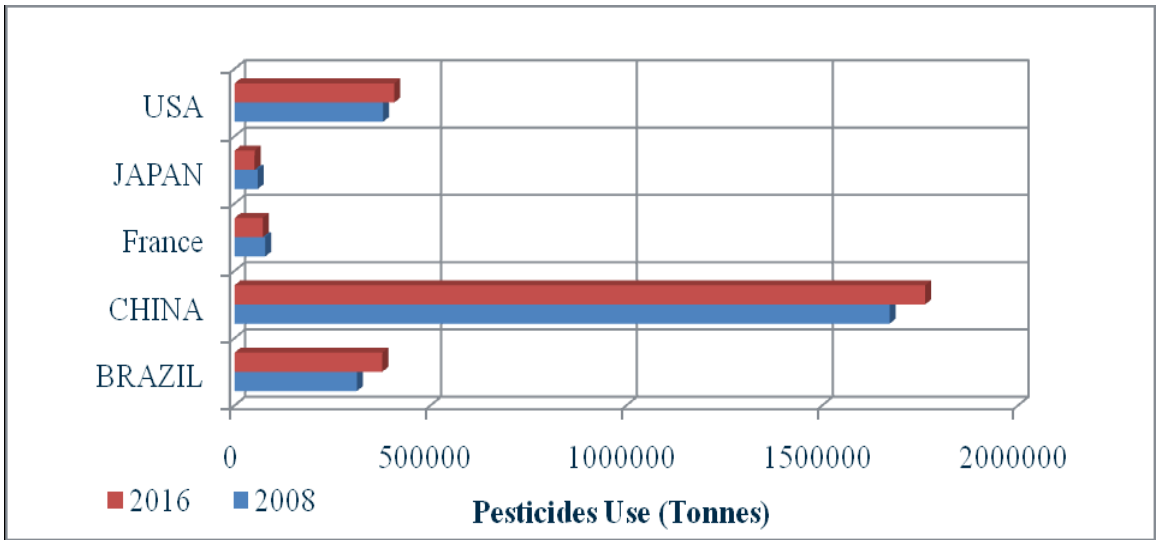
4.2.7.I. التأثيرات على النظام البيئي للمياه والهواء

تعتبر مخلفات المبيدات في الماء مصدر قلق كبير لأنها تشكل خطورة تهديد للمجتمعات البيولوجية بما في ذلك البشر. هناك مختلف الطرق التي يمكن أن تصل بها مبيدات الآفات إلى المياه مثل الانسكاب العرضي، والنفايات الصناعية السائلة، والجريان السطحي، والنقل من التربة المعالجة بمبيدات الآفات، غسل معدات الرش بعد عملية الرش، والانجراف إلى البرك والبحيرات، المجاري ومياه الأنهار، الرش الجوي للسيطرة على الآفات المثبطة للماء. تنتقل المبيدات بشكل عام من الحقول إلى خزانات المياه المختلفة عن طريق الجريان السطحي أو في الصرف الناجم عن المطر أو الري. وبالمثل، فإن وجود يمكن أن يكون سبب المبيدات الحشرية في الهواء بسبب عدد من العوامل بما في ذلك انجراف الرش، التطاير من الأسطح المعالجة، والتطبيق الجوي للمبيدات. يعتمد مدى الانجراف على: حجم القطرة وسرعة الرياح. معدل التطاير يعتمد على الوقت بعد معالجة المبيدات، السطح التي يستقر عليها المبيد في درجة الحرارة المحيطة والرطوبة والرياح السرعة وضغط بخار المكونات. التقلب أو شبه تشكل طبيعة التقلبات لمركبات مبيدات الآفات بالمثل خطر كبير من تلوث الغلاف الجوي للمدن الكبيرة[1].

8.I. الوضع الحالي للمبيدات

1.8.I. المبيدات في العالم

لقد شهدت السنوات الأخيرة من هذا القرن تزايد ا ملحوظا في إنتاج المبيدات الكيميائية في العا لم وتعد المبيدات بصورة عامة والحشرية منها بصورة خاصة إحدى المداخلات التكنولوجية لزيادة الإنتاج الزراعي ومكافحة الأمراض للإنسان والحيوان وهي تقتل أو تمنع أو حدد من تكاثر وانتشار الكائنات الحية التي تنافس الإنسان في غذائه وصحته. تعتبر الصين والولايات المتحدة الأمريكية (USA) من بين أكبر الدول استعمالا للمبيدات بكمية تقدر حوالي مليون طن سنويا في الصين و 400 ألف طن سنويا في الولايات المتحدة الأمريكية تستعمل الولايات المتحدة الأمريكية لوحدها مرتين أكثر مما تستعمله دول العا لم الثالث، لكن رغم هذا نسبة الوفيات نتيجة التسمم بالمبيدات في الو.م.أ تبقى أقل بكثير مما هو عليه الحال في دول العا لم الثالث، تليها البرازيل بحوالي 350ألف طن سنويا وإذا ما قارنا كمية الاستهلاك خلال المرحلتين نسجل تناقص في كمية المبيدات المستهلكة في كل من فرنسا واليابان مقارنة بباقي الدول[2-11].

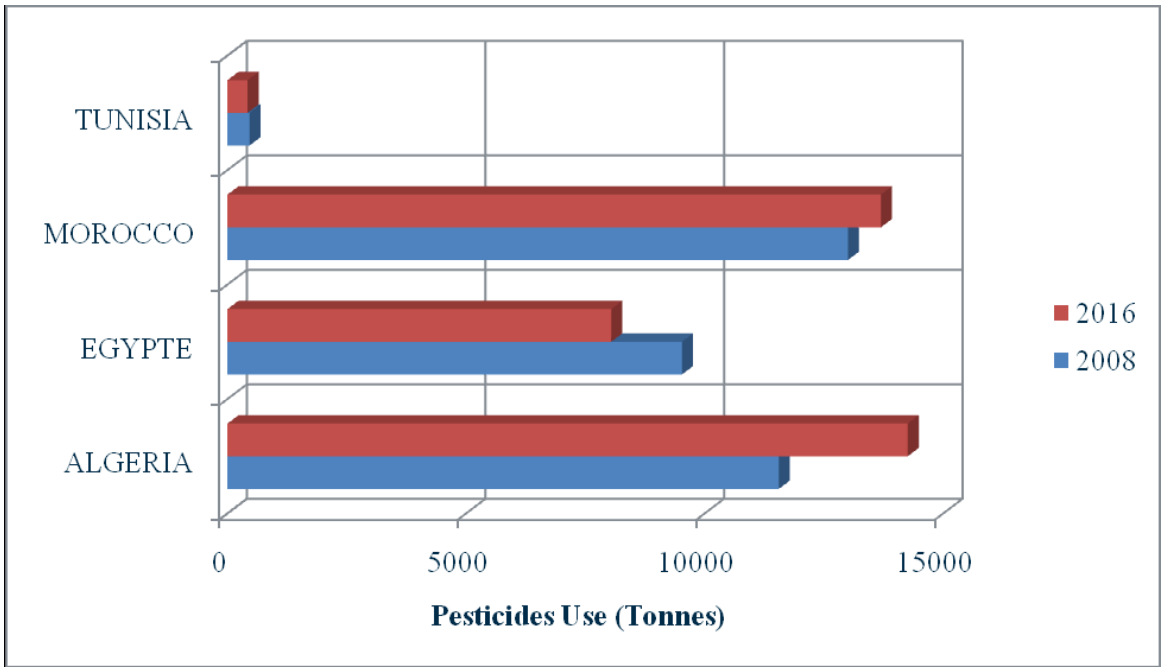


الشكل I.13.:الدول الأكثر استعمالا للمبيدات[11].

I.2.8. المبيدات في الجزائر

تزايد استعمال الجزائر للمبيدات من 11 ألف طن سنة 2008 إلى 14 ألف طن سنة 2016 ، وهناك 400 نوع مسموح به، منها 40 نوع الأكثر استعمالا من قبل المزارعين. صنفت الجزائر في الآونة الأخيرة ضمن الدول الأكثر استعمالا للمبيدات وهذا الاستعمال في تزايد مستمر. يتم صناعة المبيدات في الجزائر في السنوات الماضية من طرف شركات خاصة مثل: أسمدال ومبيدال، لكن حاليا ومع تسارع وتيرة النمو الاقتصادي دخلت شركات عديدة في صناعتها أو استيرادها، وهذا مما أدى إلى انتشار استعمالها.

انطلاقا مما يوضحه الشكل تعتبر الجزائر من أكبر دول المغرب العربي استهلاكا للمبيدات بمختلف أنواعها، وفقا للسجلات الوطنية الجزائرية للصناعات الخطرة، يوجد أكثر من 2300 طن من المبيدات المنتهية الصلاحية موزعة عبر 500 موقع، أغلبيتها هي مخلفات لمصانع وشركات وطنية .هناك أنواع عديدة من المبيدات رغم أنها محظورة في الدول المتطورة إلا أنها لازالت تستعمل لحد اليوم في الدول النامية، مع أخذ عدد أقل من الاحتياطات عند الاستعمال، أصدرت المنظمة العالمية للزراعة والتغذية بتاريخ 1 فيفري 2001 بيانا تثبت فيه أن حوالي 30% من المبيدات التي تسوق في البلدان النامية لا تتوافق مع معايير الجودة العالمية لاحتوائها على مواد إضافية شديدة السمية[2-11].



الشكل I.14: كمية المبيدات المستعلمة من طرف دول المغرب العربي[11].

I.9. علامات وأعراض التسمم بالمبييدات

نظرا لاختلاف أنواع المبيدات المستخدمة في عمليات المكافحة وطرق امتصاصها، فإن أعراض التسمم بالمبيدات يمكن كذلك أن يكون لها أشكال مختلفة، وبشكل عام فإن معظم أعراض التسمم بالمبيدات[2]، يمكن حصرها كالتالي:

1- ملاحظة الضعف الشديد والتعب لدى مستخدم المبيدات.

2- وجود حرقان وظهور بقع على الجلد.

3- سيلان دموع مستخدم المبيدات وغموض الرؤية ، مع ملاحظة توسع أو تضييق في حدقة العين.

4- الشعور بحرقة في الفم والبلعوم، سيلان لعاب شديد، غثيان، دوار، تقيؤ، بالإضافة إلى حدوث إسهال لدى مستخدم المبيدات.

5- الإحساس بالصداع، دوار، اضطراب، عدم راحة، ارتعاش في العضلات، فقدان الوعي وصعوبة في نطق الكلمات.

6- حدوث سعال وألم وضيق في الصدر، بالإضافة إلى وجود صعوبة في التنفس لدى مستخدم المبيدات.

I.10. المراجع:

I.10.1. المراجع باللغة اللاتينية:

[1] I. C. Yadav and N. L. Devi, Pesticides Classification and Its Impact on Human and Environment, Environ. Sci. & Engg. Vol. 6: Toxicology, 141-157(2017).
[3] M. D. Landgraf, S. C. Silva, M. O. Rezende, Mechanism of metribuzin herbicide sorption by humic acid samples from peat and vermicompost, Analytica Chimica Acta, 368 ,155-164(1998).
[4] J.J. Jenkins and P.A. Thomson, OSU Extension Pesticide Properties Database, EM 8709 (1999).
[5] K.H. Buchel, Chemistry of Pesticides, John Wiley & Sons, Inc. New York, USA (1983).
[6]Fishel, F.M. and Ferrell, J.A. Managing pesticide drift. Agronomy department. PI232. University of Florida, Gainesville, FL, USA (http://edis.ifas.ufl.edu/pi232) (accessed 14 October 2013).
[7] M. Eddleston, L. Karalliedde, N. Buckley, R. FernandoS. G. Hutchin, G. Isbister, F. Konradsen, D. Murray, J. C. Piola, N. Senanayake, R. Sheriff, S. Singh, S. B.Siwach and L. Smit, Pesticide poisoning in the developing world-A minimum pesticide list. *The Lancet*, 360 1163–1167(2002).
[8] WHO The WHO recommended classification of pesticides by hazard and guidelines to classification. World Health Organization, 20 Avenue Appia, 1211 Geneva 27, Switzerland, (2009).
[9] J. S. Akhila, S. Deepa and M. C. Alwar, Acute toxicity studies and determination of median lethal dose, Curret Science Vol.93 No. 7. 10 917-920(2007).
[10] T. C. Marrs and B. Ballantyne, Pesticide Toxicology and International Regulation, John Wiley & Sons, Ltd.TISBN: 0-471-49644-8 (2004).
[11] FAO/WHOPesticide residues in food 1999 evaluations. Part II toxicological. Joint FAO/WHO Meeting on Pesticide Residues. World HealthOrganization, Geneva, (2000).
[12] E. S. Lorenz, Potential health effects of pesticides. Agricultural Communications and Marketing. pp. 1–8, (2009).

I.10.2. المراجع باللغة العربية

[2] بلقط أسية، تحليل متبقيات المبيدات في النباتات وتأثيرها على الكائنات الحية، أطروحة دكتوراه، جامعة فرحات عباس- سطيف، 2020 .

الفصل الثاني

بعض الدراسات السابقة وطرق النمذجة المستعملة

في هذا الجزء تم إعطاء بعض الدراسات السابقة لتقدير خاصية متوسط التركيز المميت للمبيدات LD_{50} ، بالإضافة إلى طرق النمذجة المستعملة في هذه الدراسات وتحليلها ومناقشتها.

1.II.تعريف النمذجة

هي نشاط علمي، يهدف إلى جعل جزء محدد أو خاصية بعينها سهلة والتعريف، والقياس، والتصور. تطلب النمذجة تحديد وتعريف جوانب متعلقة بحالة في العالم الواقعي ثم استخدام أنماط مختلفة من النماذج لأهداف مختلفة، مثل النماذج المجردة لتحسين الفهم، والنماذج الإجرائية للتشغيل، والنماذج الرياضية للقياس، والنماذج الرسومية لتصوير المسألة.

2.II.تعريف النمذجة الرياضية

تعرف النمذجة بأنها عبارة عن خطوات متتالية لبناء نموذج يتناول الواقع وتترجم أجزاءه في متغيرات ومعادلات تربط بينها علاقات معينة ويرى الباحث الأمريكي راسل راي(Rassyl Ray) أن النمذجة تتراوح بين النمذجة التحليلية والنمذجة التركيبية. ويقصد بالنمذجة التركيبية الوصول للنموذج الكلي باستخدام العديد من النماذج الجزئية أو المصغرة، أما النمذجة التحليلية فالعكس حيث يتم التوصل إلى نماذج جزئية من النموذج الكلي. كما يصف العالم الأمريكي كلير (Klir) الصعوبة التي يواجهها صانع النموذج بأنها تتمثل في تقبله للواقع المراد نمذجته وإعادة بناؤه بناءً رياضياً ومنطقياً. لذلك الهدف الحقيقي من النمذجة هو تجريد تبسيطي للواقع، هذا التجريد يساعد على حل مشكلة معينة.

3.II.أسباب استخدام النمذجة الرياضية

الاتجاه إلى استخدام النمذجة يرجع للأسباب الآتية:

- قلة التكلفة.
- سهولة التنفيذ و دقة الأداء.
- توفير الجهد و الوقت.-
- المرونة.

4.II. التعريف بالطرق المستخدمة لتقدير بعض الخصائص اعتمادا على الصيغة

1.4.II. النمذجة بـ (QSTR (Quantitative Relation Structure of Toxicity

من أجل الدراسة بطريقة QSTR يجب جمع الجزيئات واستخراج كافة صفاتها المميزة و ربطها بالنشاط الكيميائي، حيث أن هذه النمذجة تعتمد على معلومات من الصيغة الكيميائية، تهدف إلى التنبؤ بأي خاصية جزيئية/النشاط بالسمية.

II.2.4. النمذجة بـــ GC(Contribution Group)

في هذه الطريقة المشكلة الرئيسية هي تحديد المجموعات، حيث أنه يتم تعيين عنصر ما و تحديد صيغته و عدد الوظائف به لتقدير مجموع المساهمات الوظيفية للجزيء.

II.3.4. طريقة مجموعة المساهمات المتداخلة GIC(Group Interaction contribution)

تم اقتراح طريقة مساهمات المجموعات المتداخلة من طرف باردیلو وغونزاليز (Pardillo et Gonzalez) وماريو وباردیلو (Marrero et Pardillo)، وذلك بالاعتماد على المجموعات المتداخلة مهما كان جزيء أو ذرة، وهي تمتاز بتقدير بعض الخصائص للمركبات المتماكبة.

II.5. تحليل بعض الدراسات السابقة لتقدير LD_{50}

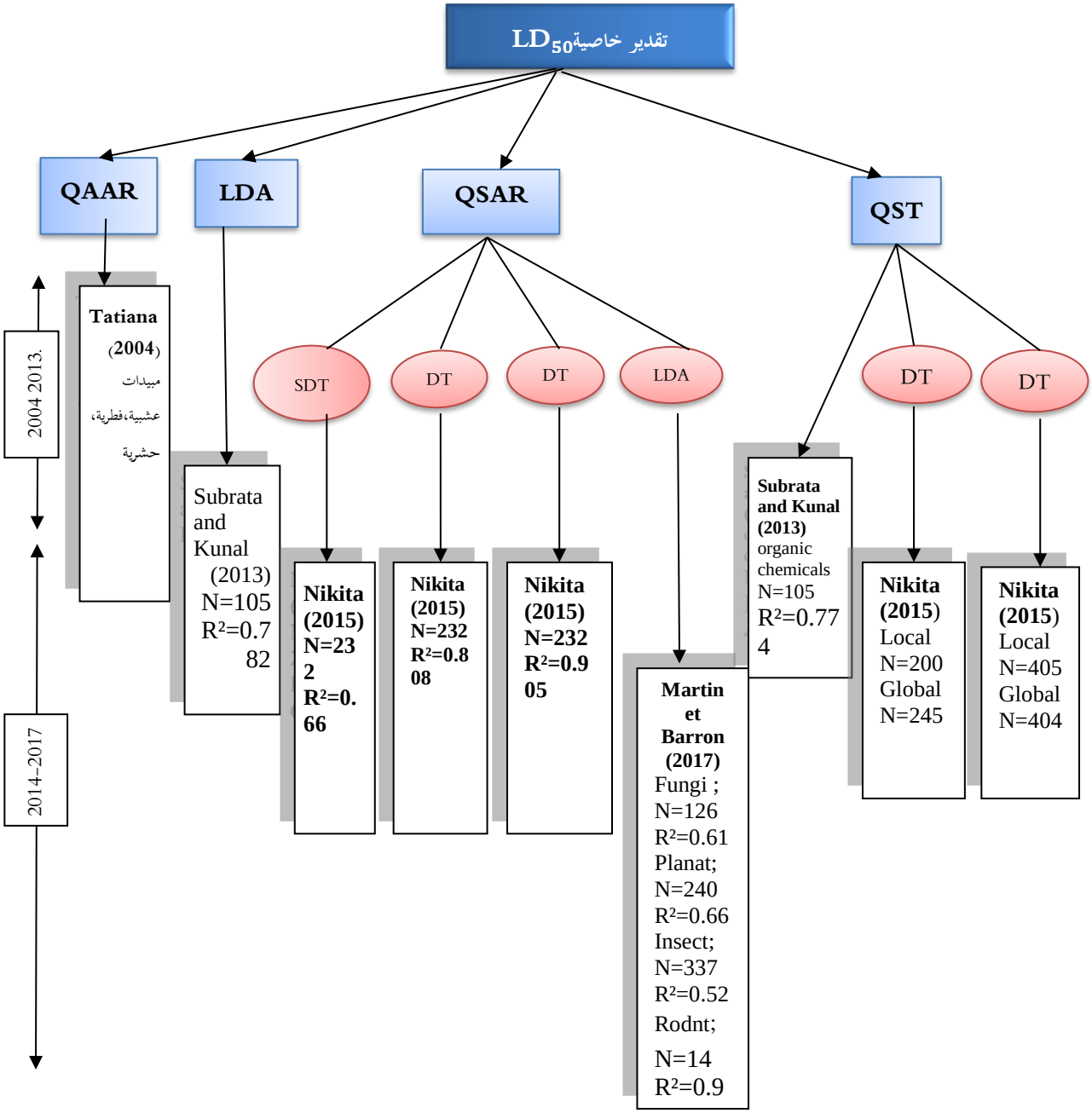
أول النماذج قدم من طرف تاتيانا وزملاؤه (Tatiana et *al.*)(2004)، إذ تمت دراسة المبيدات (عشبية، فطرية، حشرية) لـ199 مبيد بطريقة QAAR(Quantitative Activity Relationships for Aquatic)

في البداية كانت النمذجة وتقدير خاصية LD_{50}من طرف سبراتا وكانال (Subrata and Kanal)(2013) ، حيث استخدم طريقة النمذجة QSTRلـــ105مادة عضوية في الطحالب الخضراء وبنفس الطريقة درس نيكيتا وزملاؤه (Nikita et al.) (2015)على 3 أنواع من القشريات.

في 2015 درس نيكيتا و زملاؤه (Nikita et *al.*) 5 أنواع من الطيور إعتمادا على نمذجة QSAR(QuantitativeStructure-Activity relationship) ، وبنفس الطريقة درس مارتين وبـــــارون (Martin et Barron) على مجموعة مواصفات تقدر بـ 628 موزعة بين 4 أنظمة مختلفة (فطريات،نباتات، حشرات، قوارض)

جدول.II.1. بعض النماذج السابقة لتقدير خاصية LD_{50}

R^2	عدد المركبات	أنواع المركبات	النظام		نوع النمذجة	المؤلف
0.92	199	-	مبيدات عشبية (Herbicides) مبيداتفطرية(Fungicides)مبيدات حشرية(Insecticides)		QAAR	Tatiana et *al.* (2004) [1]
0.94	174	without organophosphorus	-			
0.92	39	-	مبيدات عشبية (Herbicides) مبيداتفطرية(Fungicides)مبيدات حشرية(Insecticides)			
0.91	32	-	مبيدات عشبية (Herbicides) مبيداتفطرية(Fungicides)مبيدات حشرية(Insecticides)			
0.93	12	-	مبيدات عشبية (Herbicides) مبيداتفطرية(Fungicides)مبيدات حشرية(Insecticides)			
0.83	65	without organophosphorus	/			
0.774	105	organic chemicals	الطحالب الخضراء(Green algae)		QSTR	Subrata and Kunal (2013)[2]
0.782	105	organic chemicals	الطحالب الخضراء(Green algae)		LDA	
0.667	131	السمان	طيور(Birds)		QSAR	Nikita et *al.* (2015) [3]
	46	بطة الملارد				
	27	الدراج الدائري العنق				
	19	السمان اليباني				
	9	عصفور المنزل				
0.808	131	السمان	طيور(Birds)			
	46	بطة الملارد				
	27	الدراج الدائري العنق				
	19	السمان اليباني				
	9	عصفور المنزل				
0.905	131	السمان	طيور(Birds)			
	46	بطة الملارد				
	27	الدراج الدائري العنق				
	19	السمان اليباني				
	9	عصفور المنزل				
0.947	200	(Americamysis bahia)	القشريات(Crustaceans)		QSTR	Nikita et *al.* (2015) [4]
0.956		(Gammarus fasciatus)				
0.971		(Penaeus duorarum)				
0.987	405	Americamysis bahia	القشريات(Crustaceans)			
0.983		Gammarus fasciatus				
0.974		Penaeus duorarum				
0.932	245	Americamysis bahia	القشريات(Crustaceans)			
		Gammarus fasciatus				
		Penaeus duorarum				
0.962	404	Americamysis bahia	القشريات(Crustaceans)			
		Gammarus fasciatus				
		Penaeus duorarum				
0.65	76	-	Biosynthesis inhibition	Fungi	LDA and QSAR	Martin et Barron (2017) [5]
			Reactivity			
			Respiration modulation			
0.59	303	-	Biosynthesis inhibition	Plant		
			Growth regulation			
			Photosynthesis modulation			
0.86	20	-	Neurotoxicity	Insect		
			Respiration modulation			
0.98	14	Anticoagulation	Rodent			



الشكل II.1.: رسم تخطيطي للمراحل التي مرت بها من 2004 –2017

من خلال المخطط السابق لأهم التقديرات يمكن إعطاء المراحل الزمنية التي يمر بها على النحو التالي:

2004-2013: بناءا على ما سبق يمكن القول في هذه المرحلة تمت محاولة تقدير خاصية LD_{50} ، وعلى الرغم من كل الجهود إلا أن هذه الدراسة بها عيوب نذكر منها :

- إعطاء نماذج خطية وغياب الخطأ النسبي والمطلق.
- الدراسة حول نظام واحد.

2013–2017: الجدير بالذكر في هذه المرحلة محاولة الحصول على قاعدة معطيات ذو عدد كبير وبذلك يمكن القول أن ما يميز هذه المرحلة ما يلي :

- إختيار قاعدة معطيات كبيرة ذو أنظمة متنوعة
- دمج بين طريقتين أو أكثر

و في هذا تم العمل على قاعدة معطيات كبيرة، ذو أنظمة مختلفة و مجموعات متنوعة بالإضافة إلى استخدام طريقة GIC، مع إضافة الخطأ النسبي.

II.6. خلاصة الفصل الثاني

نلاحظ من خلال الدراسات السابقة أن جدية الوصول إلى الأساليب الحسابية للتنبؤ بسمية المبيدات الكيميائية ابتداءا من سنة 2004 إلى 2017، حيث تم استخدام طريقة QSTR مقترنة بطرق أخرى في كل مرة مثل(LDA,MOA)وهذا للتنبؤ بطريقة أفضل، وإلى حد الآن لا تزال الدراسات متواصلة للوصول إلى طريقة أنجح وأسرع للتنبؤ بالسمية.

II .7. المراجع :

II.7.1.المراجع باللغة اللاتينية:

[1] T. Netzeva, M. Pavan and A. Worth, Review of Data Sources, QSARs and Integrated Testing Strategies for Aquatic Toxicity, JRC Scientific and Technical Reports, (2007).

[2]S. Pramanik, K. Roy. Predicting Toxicities of Diverse Chemical Pesticides in Multiple Avian Species Using Tree-Based QSAR Approaches for Regulatory Purposes, Jornal of chemical information and modeling,(2015).

[3]N. Basant, S. Guptab and K. P. Singh. Predicting aquatic toxicities of chemical pesticides in multiple test species using nonlinear QSTR modeling approaches, jornal homepage :www.elsevier.com/locate/chemosphere 139 246-255,(2015).

[4] N. Basant, S. Guptab and K. P. Singh, Modeling the toxicity of chemical pesticides in multiple test species using local and global QSTR approaches, This journal is © The Royal Society of Chemistry, (2015).

[5]T. M. Martina, C. R. Lilavoisb and M. G. Barronb, Prediction of pesticide acute toxicity using twodimensional chemical descriptors and target
species classification, jornal homepage : http://www.tandefonline.com/loi/gsar20, (2017).

II 7.2.المراجع باللغة العربية:

[6]مقدم خضرة، Approche multi-échelles pour l'estimation des propriétès des liquides ioniques ، أطروحة دكتوراه، جامعة قاصدي مرباح–ورقلة، 2017.

الفصل الثالث

الدارسة الوصفية والتقنية لطريقة تقدير متوسط الجرعة المميتة LD_{50}

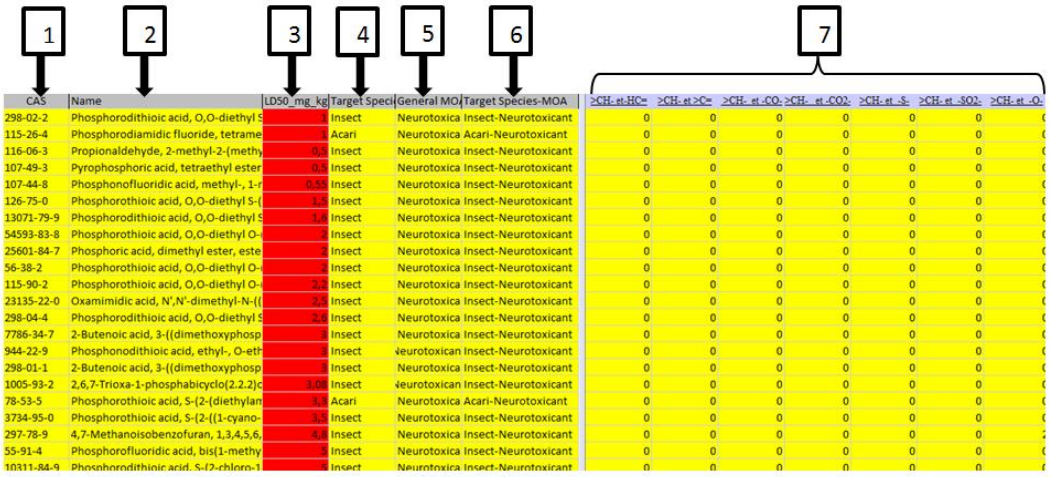
في هذا الفصل، سوف نلقي الضوء على الطرق المقترحة لتقدير قيمة LD_{50} لمركبات مبيدات الآفات، بإعطاء تعريف الجرعة المميتة 50% (LD_{50})، و عرض تفصيلي حول قاعدة المعطيات المستعملة، من حيث جمعها، اختيارها، و فرزها، تليه تحديد آليات التقدير، الدقة.

1.III. تعريف الجرعة المميتة 50%

يتم تقدير السمية البشرية عمومًا بناءًا على نتائج الاختبار على الفئران ونماذج حيوانية أخرى. أي مادة كيميائية أو مادة سامة للفئران ليست بالضرورة سامة للإنسان أو للحيوانات الأخرى. تكون بعض المبيدات الآفات قاتلة بعد جرعة واحدة كبيرة (سمية حادة)، قد يكون البعض الآخر خطيراً بعد الجرعات الصغيرة المتكررة (سمية مزمنة). يستخدم مقياس واحد بسيط للسمية المقايسات الحيوية لقياس معدلات الوفيات، من أجل تحديد تأثير السم. يُعرف هذا الإجراء عمومًا باسم الجرعة المميتة 50%(LD_{50}). يتم تعريف LD_{50} على أنه LD حيث توفي 50% من السكان في فترة معينة تحت ظروف عملية خاضعة للرقابة. الجرعة المميتة 50% هي عادة خطوة فحص أولية في تقييم الخاصية السامة للمادة (متوسط الجرعة المميتة(LD_{50})[1]؛ هو جرعة مفردة من مادة تؤدي إلى موت 50% من سكان الحيوانات،؛ حيث أن الاختبار الذي يتم إعطاؤه بأي طريقة من الطرق مثل الاستنشاق عن طريق الفم أو الجلد أو الوريد[2]. يفحص تحديد هذا لاختبار العلاقة بين الجرعة والاستجابة الأكثر تطرفاً – الموت. وكلما كانت المادة الكيميائية أكثر فاعلية أو سامة، قلل من الجرعة المميتة 50% وأصغر الجرعة اللازمة للتسبب في الموت، لذلك فإن مبيد الآفات الذي يحتوي على جرعة مميتة 50% عن طريق الفم يبلغ 500 ملغم / كغم يكون أقل سمية بكثير من مبيد الآفات 5 مجم / كجم. عادة يتم التعبير عن الجرعة المميتة 50% كمليغرام / كيلوغرام من وزن الجسم، أي مليغرام من المادة لكل كيلوغرام من وزن جسم الحيوان. مليغرام (ملغ) وكيلوغرام (كلغ) وحدات متريّة للوزن، مليغرام لكل كيلوغرام هو نفسه جزء في المليون (جزء في المليون)[1].

2.III. قاعدة المعطيات المستعملة

تم تحضير 1052 قيمة لهذه خاصية كقاعدة معطيات تشمل كل المركبات المبيدات بمختلف أنواعها لدراسة هذه الخصائص. بعد ما تم الفرز و تأكد من القيم البيانية تحصلنا على 628 مركب يحتوي على قيمة الجرعة المميتة 50% (LD_{50})، حيث تم اقتراح قاعدة البيانات هذه من طرف مارتن و زملاؤه (Martin et *al.*)[3].



الشكل.III.1.الشكل العام لقاعدة البيانات

1) CAS هو رمز للمبيد.

2) Name هو اسم المبيد.

3) LD_{50} هي الجرعة المميتة 50%.

4) Target هي الأصناف (الأنواع) المستهدفة.

5) General MOA هي طرق تأثير.

6) Target Species-MOA هو الأنواع المستهدفة–طرف تأثير.

7) مساهمة مجموعات الموجودة في قاعدة.

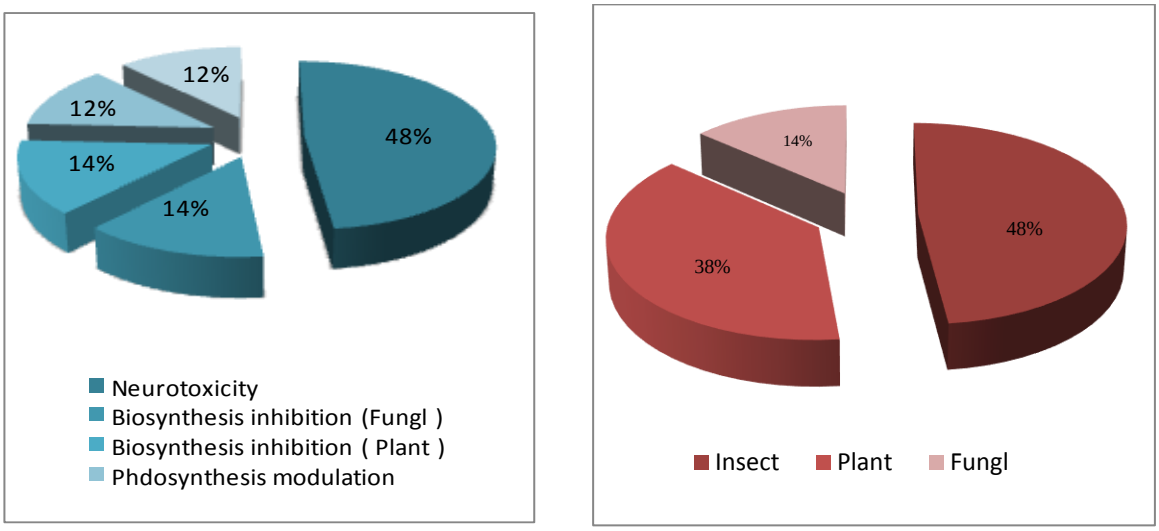
من خلال قاعدة المعطيات لاحظنا في دراسة هذه الأنظمة عدد تجزئة لروابط مركبات يفوق140 تجزئة و هذا الاخير لا يسمح بتقدير قيم الخاصية LD_{50}، حيث تم إعادة تقسيم قاعدة البيانات حسب تأثير (MOA) حيث عدد تجزئة الروابط لا يقل على 60 تجزئة لكل نظام من الأنظمة.

بتقسيم قاعدة البيانات حسب أنظمة المبيدات و حسب تأثيراتها الى 5 قواعد بيانات تحصلنا على :

1 . نظام الفطريات Fungi ذو تأثير تثبيط التخليق الحيوي Biosynthesis inhibition بـــ 85 مركب.

2 . نظام النباتاتPlant 204 مركب يحتوي على3 تأثيرات: تأثير تثبيط التخليق الحيوي Biosynthesis inhibition،بـ88 مركب وتأثير تنظيم النموGrowth regulation بـــ 76 مركب و تأثير تعديل التمثيل الضوئي Phdosynthesis modulation.

3 . نظام الحشرات Insect بتأثير السمية العصبية Neurotoxicity بـــ 303 مركب.



الشكل III.2: يمثل نسب كل من نظام وتأثيره متواجد في قاعدة البيانات.

كما أيضا يوضح الجدولIII.1 عدد تواجد المركبات في كل نظام حسب تأثيرها.

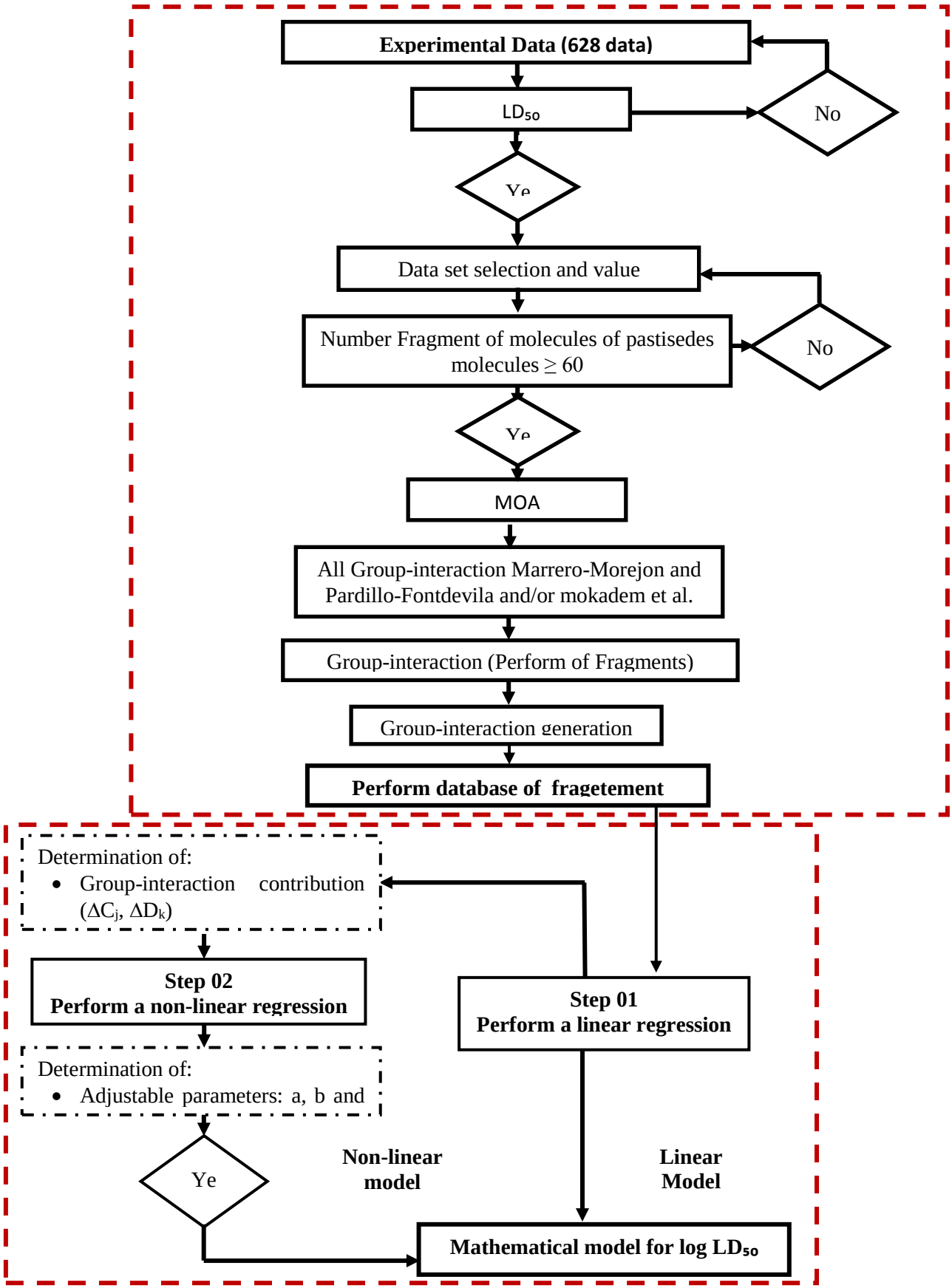
الجدولIII.1: النتائج الإحصائية لعدد مركبات موجودة في كل تأثير في قاعدة البيانات.

	Insect neurotoxicity	Fungi Biosynthesis inhibition	Plant Biosynthesis inhibition	Plant Growth regulation	Plant Photosynthesis modulation
مركبات الفوسفات العضوية	155	4	7	2	0
مركبات الكربامات	50	10	21	15	4
مركبات البنزنية	31	10	7	10	11
مركبات الحلقية	51	3	10	5	20
مركبات كلور عضوي	0	37	17	34	27
مركبات أخرى	16	20	22	10	7

إن المعيار الرئيسي لاختيار القيم التجريبية لمجموعة البيانات هو العدد، وكذلك نوعية القيم التجريبية المختارة، إذ أن تواجد القيم التجريبية في عدة مراجع مختلفة(تكرار)، وجود قيم متقاربة لنفس المركبات، كما ينبغي قياسها في نفس الظروف، مع مراعات دقة عالية في النتائج. من أجل تثمين النموذج المتحصل عليه تم استعمال 80%من قاعدة المعطيات للحصول على النموذج، الباقي استعملت في اختبار التحقق من صحتها في اغلب البيانات المتكررة في مساهمة المجموعات المتداخلة.

3.III. تحديد طرق التقدير، الخوارزمية

في هذه الدراسة، تم الاعتماد على طريقة مساهمة المجموعات المتداخلة الاعتماد على نهج كل باردیلو-فونتيفيلا وغونزاليس-روبيو (Pardillo-Fontdevila and Gonzalez-Rubio)[4]، وماريو-موريخون و باردیلو-فونتيفيلا (Marrero-Morejon and Pardillo-Fontdevila)[5]،ومقدم وزملاه (Mokadem et *al.*)[6].



الشكلIII.3: خوارزمية من أجل حساب أي خاصية إبتداءا من الخاصية الجزيئية استعمال GIC مع طريقة تقسيم المركبات

4.III. الدقة

من المعاملات الإحصائية لتقيم الأداء لهذه العملية بمتوسط الانحراف المطلق(AAD)، متوسط الانحراف النسبي (AARD%)ومعامل الارتباط (R^2) هي أدوات تعطي فكرة على مصداقية النموذج المتطور وهي تحسب حسب المعادلات التالية:

$$AAD = \frac{100}{\mathrm{n}} \sum_{i=1}^{n} \left| \log \mathrm{LD}^{50\mathrm{exp}} - \log \mathrm{LD}^{50\mathrm{cal}} \right| (2.1)$$

$$\mathrm{AARD\%} = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^{n} \left| \log \mathrm{LD}^{50^{cal}} \Big/ \log \mathrm{LD}^{50^{exp}} - 1 \right| (2.2)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n} \left| \log \mathrm{LD_{50}}^{\mathrm{cal}} \Big/ (\log \mathrm{LD_{50}}^{\mathrm{ext}} - \log \mathrm{LD_{50}}^{exp}) \right|^2}{\sum_{i=1}^{n} \left| \log \mathrm{LD_{50}}^{\mathrm{cal}} \Big/ (\log \mathrm{LD_{50}}^{\mathrm{ext}} - average(\log \mathrm{LD_{50}}^{exp})) \right|^2} (2.3)$$

حيث $\mathrm{Log\ LD_{50}}^{\mathrm{cal}}$ و $\mathrm{Log\ LD_{50}}^{\mathrm{exp}}$ وهي قيم الخاصية التجريبية والمحسوبة على التوالي،i يمثل الجرعة المميتة $\mathrm{LD_{50}}$ الموافق، n عدد بيانات قاعدة المعطيات المدروسة.

5.III. خلاصة الفصل الثالث

في هذا الفصل، الأدوات والتقنيات المستخدمة لدينا

- وصف وترتيب قاعدة البيانات التي تحتوي على 628 مركب مبيد، حيث أبرزنا الاختلاف بينها في كل مجموعة من مبيدات، الرمز، النسبة، الكتلة المولية، تأثير العام لها.
- استعمال طريقة مساهمة المجموعات المتداخلة اعتمادا على الخوارزمية من اجل حساب خاصية من الخاصية الجزئية استعمال (GIC) مع تحديد طريقة تقسيم المركبات، مع تحديد الدقة والتحقق من صحة النتائج.

6.III.المراجع

1.6.III. المراجع باللغة اللاتينية

[1].U. Saleema, S. Amin, B Ahmad, A. Haroon, A. Fareeh, S. Mary, Acute oral toxicity evaluation of aqueous ethanolic extract of Saccharum munja Roxb, Roots in albino mice as per OECD 425 TG 4, 580–585(2017).

[2]. M. Chandra, J. Rajl, T. Dogra, A. C. Rajvanshi, A. Raina Determination of modian lethal dose of triazophos with dmso in wistar rats, 0974-2441, (2014).

[3 T. M. Martin, C. R. Lilavois and M. G. Barron, Prediction of pesticide acute toxicity using twodimensional chemical descriptors and target
species classification, jornal homepage : http://www.tandefonline.com/loi/gsar20, 2017.

[4]. M. Morej, P. Fontdevila , Estimation of pure compound properties using group-interaction contributions, AIChE J., 45 615-621(1999).

[5]. P. Fontdevila , G. A. Rubio, A group-interaction contribution approach. A new strategy for the estimation of physico-chemical properties of branched isomers, Chem. Eng. Commun, 163, 245-254(1998).

2.6.III. المراجع باللغة العربية

[6] مقدم خضرة، Approche multi-échelles pour l'estimation des propriétès des liquides ioniques ، أطروحة دكتوراه، جامعة قاصدي مرباح –ورقلة،2017.

الفصل الرابع

النتائج ومناقشتها، مقارنتها

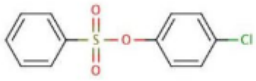
في هذه الدراسة تم الحصول على نموذج خطي ونموذج غير خطي لتقدير خاصية متوسط التركيز المميت LD_{50} للمبيدات بواسطة مجموعة من المبيدات المتنوعة الأنظمة.

IV.1. النتائج

IV.1.1. النظام البيئي للحشرات

تمثل الحشرات دورا مهما في التوازن البيئي ولها نظام خاص، حيث أنه من أهم الأنظمة البيئية؛ إذ يتكون من مجموعة من الكائنات الحية التي لا يتقبلها الإنسان، لكنها منتشرة على نطاق كبير جدا حوله. هناك بعض الحشرات تسبب ضررا للإنسان وللبيئة لذا يجب الوقاية منها، وذلك بمعرفة أخطارها، وتحسب سمية المبيدات الحشرية في هذا العمل كما يلي:

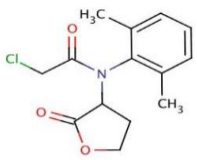
الجدول IV.1.مثال تطبيقي لتقدير السمية المبيدات لنظام حشري

LogLD50=2.26+∑iNiCi logLD50(pred)=3.13, AARD (%)=0%			
Benzenesulfonic acid, 4-chlorophenyl ester Cas N° :80-38-6 logLD50(exp)=3.13			
Interactions	N_i	C_i	N_i*C_i
>C= & $-SO_3$	2	-235.829	-471.685
>C= & –Cl	1	-392.625	-392.625
-HC= &>C=	6	160.348	962.088
-HC= & -HC=	6	-197.802	-1186.812

IV.1.2. النظام البيئي للفطريات

تلعب الفطريات دورا مهما في تحليل المواد العضوية و تحويلها إلى مواد بسيطة يسهل امتصاصها بالنباتات، و على الرغم مما يجنيه الإنسان من فوائد منها إلا أن لها أضرار جسمية تلحقها به في بعض الحالات، لذا نقوم بالحماية منها بواسطة المبيدات، وتحسب سمية المبيدات الفطرية كما يلي:

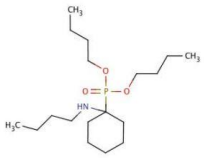
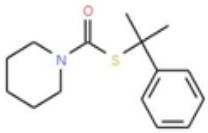
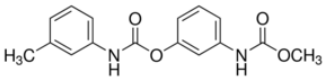
الجدول2.IV: مثال تطبيقي لتقدير السمية المبيدات لنظام للفطريات

LogLD50=3.119+∑iNiCi logLD50(pred)=3.13, AARD (%)=0%			
Benzenesulfonic acid, 4-chlorophenyl ester Cas N° :80-38-6 logLD50(exp)=3.13			
Interactions	N_i	C_i	N_i*C_i
>C= &-CH_3	2	-0.325	-0.65
>CH_2- & -CH_2-	1	0.115	0.115
>CH2- & >N-	1	-0.299	-0.299
>CH2- & -CO-	1	-0.75	-0.75
H_2C & –Cl	1	-1.011	-1.011
>CH_2- & -CO_2	1	1.91	1.91
> C= & > C=	2	0.162	0.324
>C= &>N-	1	0.17	0.17
>N- & -CO-	1	-0.068	-0.068
>CH- & -CO2	1	0.262	0.262
-HC= & -HC=	2	0.046	0.092
-HC= &>C=	2	-0.112	0.224
>CH- &>N-	1	0.03	0.03

3.1.IV. النظام البيئي للنباتات

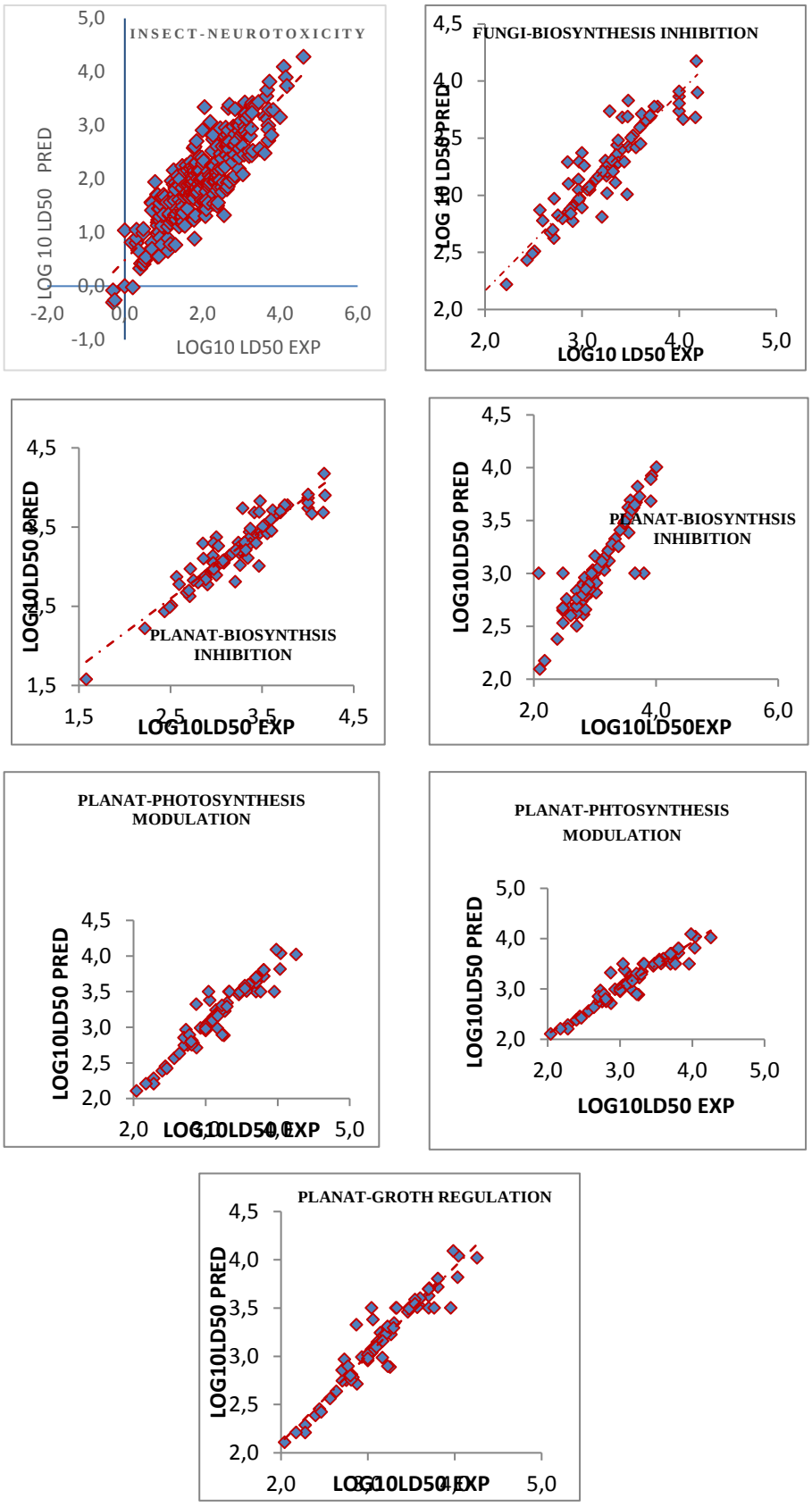
هي جزء أساسي من الكائنات الحية تتمثل في الأعشاب،الأزهار،الأشجار...إلخ. لها فوائد وأضرار على الوسط البيئي، وتحسب سمية المبيدات النباتية بالطريقة التالية حسب التأثيرات المدروسة الجدول3.IV.

الجدول3.IV. مثال تطبيقي لتقدير السمية المبيدات النباتية حسب التأثيرات المدروسة

نظام تنظيم النمو (Groth regulation)				نظام تثبيط التخليق الحيوي(Biosynthsis inhibition)			
LogLD50=2.989+∑iNiCi logLD50(pred)=3.477, AARD (%)=0%				LogLD50=3.683+∑iNiCi logLD50(pred)= 2.975, AARD (%)=0%			
				LogLD50=361,969 3.683+∑iNiCi /(3058,61+3.683+∑iNiCi) logLD50(pred)= 2.975, AARD (%)=0%			
Phosphonic acid, 1-(butylamino)cyclohexyl-, dibutyl ester Cas N° :51249-05-9 logLD50(exp)= 3.477				Piperidinecarbothioic acid, S-(1-methyl-1-phenylethyl) ester Cas N° :61432-55-1 logLD50(exp)=2.975			
Interactions	N_i	C_i	N_i* C_i	Interactions	N_i	C_i	N_i* C_i
> C< et >S	1	1.499	1.499	> C< et >S	1	1.499	1.499
>C< et >C=	1	-5.842	-5.842	>C< et >C=	1	-5.842	-5.842
CH_3 et > C<	2	1.771	3.542	CH3 et > C<	2	1.771	0,0869
CH_2- et -CH2	2	-0.089	-0.178	CH2- et -CH2	2	-0.089	-0.178
CH2- et >CH	2	0.64	1.28	CH2- et >CH	2	0.64	1.28
-HC= et-HC=	4	-0.007	0.028	-HC= et -HC=	4	-0.007	0.028
-HC= et >C=	2	-0.204	-0.408	-HC= et >C=	2	-0.204	-0.408
>CH- et >N-	2	0.687	1.374	>CH- et >N-	2	0.687	1.374
>N- et -CO-	1	-0.466	-0.466	>N- et -CO-	1	-0.466	-0.466
>S- et -CO-	0	0	0	>S- et -CO-	0	0	0
				نظام تعديل التمثيل الضوئي (Photosynthesis modulation)			
				LogLD50=3.503+∑iNiCi logLD50(pred)=3.602, AARD (%)=0%			
				LogLD50=37,687(1-$e^{(-0,0283.503+\sum iNiCi)}$ logLD50(pred)= 3.602, AARD (%)=0%			
				Carbamic acid, (3-methylphenyl)-, 3-((methoxycarbonyl)amino)phenyl ester (9CI) Cas N°:3766-60-7 logLD50(exp)=3.602			
				Interactions	N_i	C_i	N_i* C_i
				CH3 et -CO2	1	2.528	2.528
				CH3 et >C=	1	-0.786	-0.786
				-HC= et -HC=	4	0.406	1.624
				-HC= et >C=	8	-0.792	6.336
				>C= et -CO2	1	0.091	0.091
				>C= et >N-	2	-0.205	-0.41
				>N- et -CO2	2	2.487	4.974
				>N- et –H	2	-2.61	-5.22

2.IV. مناقشة النتائج

تم إجراء مقارنة بين الخطأ النسبي التجريبي والمحسوب لمساهمة المجوعات المتداخلة، ويظهر أن هناك ترابط بين القيم، و لابد من الإشارة إلى أن القيم المتحصل عليها أفضل من القيم التجريبية. في الشكل IV.1.



الشكل 1.IV: مقارنة بين الخطأ النسبي التجريبي والمحسوب لمساهمة المجوعات المتداخلة

يمكن أيضا تقييم أداء النموذج المطورة من خلال المعايير الإحصائية الواردة في الجدول.**IV**.4.

الجدول.IV.4.النتائج الإحصائية لنموذج المقترحة بطريقة GIC لخاصية LD_{50}

النظام	Insect	Fungi	Planat			
تأثير	Neurotoxicity	Biosynthsis inhibition	Biosynthsis inhibition		Grothrgulation	Photosynthesis modulation
عدد المركبات	303	85	88		76	76
نوع النمذجة	خطي	خطي	خطي	غير خطي	خطي	خطي	غير خطي
معامل الارتباط R^2	0.735	0.782	0.866	0.866	0.840	0.911	0.911
الخطأ النسبي %AARD	23.769	5.157	3.078	3.078	3.392	2.497	2.497

ومن زاوية أخرى يمكن تقييم الأداء من خلال المعايير الإحصائية الواردة في الجدول**IV**.6. ليتم اتخاذ أي إجراء لاستبعاد البيانات التجريبية "المشكوك فيها"، أو التي يُفترض أنها غير دقيقة، ومع ذلك بالنسبة لمساهمة التفاعل المتداخلة، لا يوجد سوى:

- 148 نقطة بيانات مع انحراف نسبي مطلق أكبر من ٪15أي٪48.84 من إجمالي في قاعدة البيانات السمية العصبية للحشرات (Insect Neurotoxicit).
- 6نقاط بيانات مع انحراف نسبي مطلق أكبر من ٪15أي٪7.05 من إجمالي قاعدة بيانات تثبيط التخليق الحيوي للفطريات(Fungi Biosynthsis inhibition).
- 10نقاط بيانات مع انحراف نسبي مطلق أكبر من ٪15أي٪11.36 من إجمالي قاعدة بيانات تثبيط التخليق الحيوي للنباتات(Planat Biosynthsis inhibition).
- 9نقاط بيانات مع انحراف نسبي مطلق أكبر من ٪15أي٪10.22 من إجمالي قاعدة بيانات تثبيط التخليق الحيوي للنباتات(Planat Biosynthsis inhibition).
- 5 نقاط بيانات مع انحراف نسبي مطلق أكبر من ٪15أي٪6.57 من إجمالي قاعدة بيانات تنظيم النمو للنباتات(Planat Grothrgulation).
- 6نقاط بيانات مع انحراف نسبي مطلق أكبر من ٪10أي٪7.89 من إجمالي قاعدة بيانات تعديل التمثيل الضوئي للنباتات (Planat Photosynthesis modulation).
- 6نقاط بيانات مع انحراف نسبي مطلق أكبر من٪15أي٪7.89 من إجمالي قاعدة بيانات تعديل التمثيل الضوئي للنباتات(Planat Photosynthesis modulation).

الجدول.IV.6.توزيع الخطأ النسبي وعدد المركبات

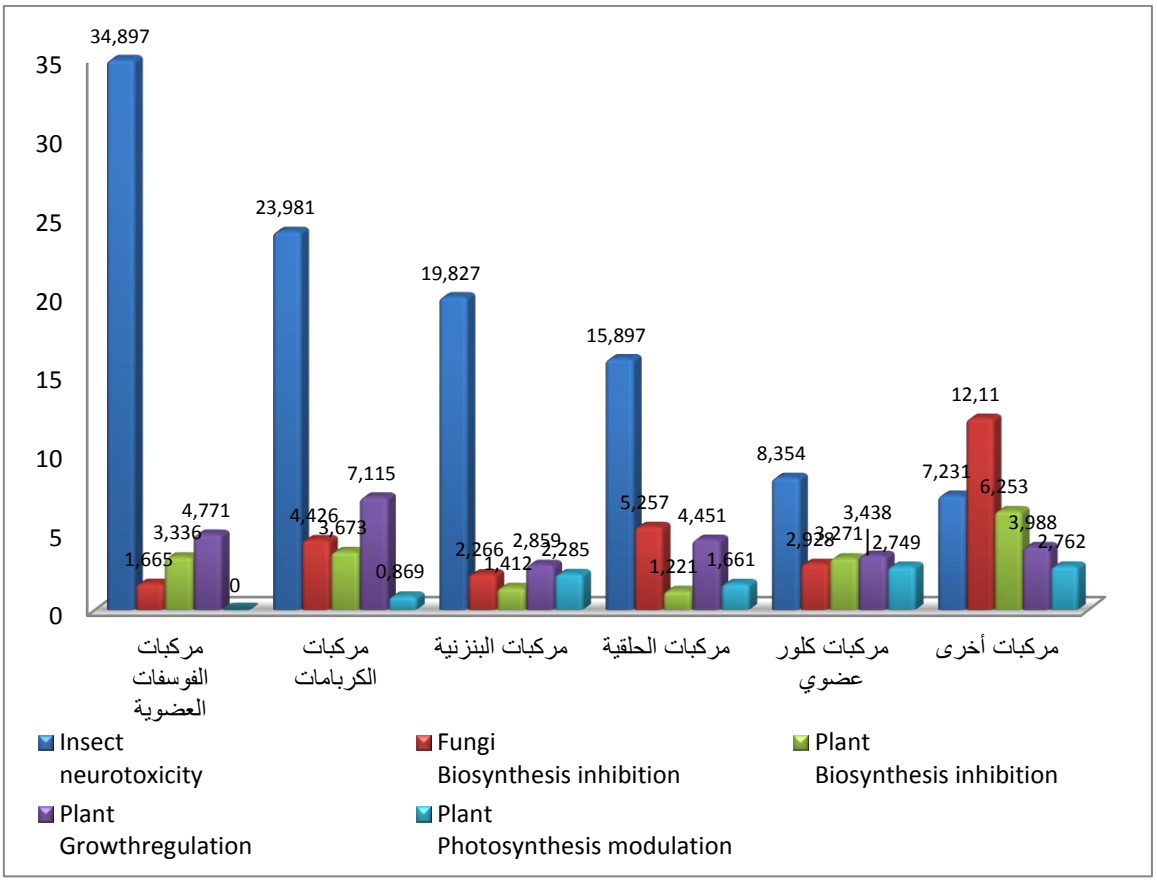
النظام	Insect	Fungi	Planat			
التأثير	Neuro toxicity	Bio synthsis inhibition	Biosynthsis inhibition		Groth Rgulation	Photosynthesis modulation
عدد المركبات	303	85	88		76	76
نوع النمذجة	خطي	خطي	خطي	غير خطي	خطي	غير خطي
AARD (%)	23,769	5,157	3.078	3.078	3.391	2,497
ΔP min (%)	0	0	0	0	0.031	0
ΔP max (%)	364,55	158,98	50,50	15.50	44.67	15,39
|ΔP| (%) < 5	72	61	66	66	60	58
	1,324	1.235	1	1.114	1.172	0.962
|ΔP| (%)[5–10]	51	14	11	12	11	12
	6,367	7.75	7.524	6.715	6.881	4.943
|ΔP| (%)[10–15]	37	0	0	0	0	0
	12,381	0	0	0	0	0
|Δp| (%) > 15	148	6	10	9	5	6
	8,410	39.67	11.904	12.413	21.669	12.443

IV .3. المقارنة

تمت مقارنة الدراسة السابقة لـمارتين و زوملاءه(Martin et *al*) والنتائج المتحصل عليها في دراستنا حسب الجدول و المنحنى التالي:

الجدول IV **.7**مقارنة قيم الخطأ النسبي للدراسة السابقة بالقيم التجريبية

النظام	التأثير	عدد المركبات	مارتين و زملاؤه Martin et al. (2017)		في هذا العمل in this work	
			الخطأ النسبي	R^2	الخطأ النسبي	R^2
Insect	Neurotoxicity	303	55.779	0.59	23.769	0.76
Fungi	Biosynthsis inhibition	85	27.876	0.77	5.1579	0.78
Planat	Biosynthsis inhibition	88	19.819	0.86	3.078	0.86
	Grothrgulation	76	20	0.83	3.391	0.84
	Photosynthesis modulation	76	22.018	0.65	2.497	0.91



الشكل 2.IV: الخطأ النسبي لكل مركبات متواجد حسب تأثيرها في قاعدة البيانات

4.IV. خلاصة الفصل الرابع

في هذا الفصل تطرقنا إلى أهم النتائج التي تحصلنا عليها في دراسة خاصية LD_{50} للتنبؤ بسمية المبيدات؛ إذ أدرجنا تقنية GICمن أجل النمذجة الخطية وغير خطية وتحصلنا على معاملات ارتباط R^2 ومتوسط خطأ نسبي AARD% أحسن من الدراسة السابقة ، وهذا الأخير أعطى قيمة لهذه الدراسة حيت الدراسة الأفضل والأقرب.

5.IV. المراجع

1.5.IV. المراجع باللغة اللاتينية

[2] T. M. Martin, C. R. Lilavois and M. G. Barron, Prediction of pesticide acute toxicity using twodimensional chemical descriptors and target
species classification, jornal homepage : http://www.tandefonline.com/loi/gsar20, (2017).

2.5.IV. المراجع باللغة العربية

[1] مقدم خضرة، Approche multi-échelles pour l'estimation des propriétès des liquides ioniques، أطروحة دكتوراه، جامعة قاصدي مرباح ورقلة، 2017.

الخلاصة العامة

الخلاصة العامة

يهدف هذا العمل إلى وصف طريقة وإعطاء نماذج رياضية نظرية تسمح بالتنبؤ لقيمة الجرعة المميتة 50% (LD_{50}) لمركبات من نوع المبيدات اعتماد على صيغتها، وهذه الأخيرة تعتبر المرشح الأولى لدراسة وتقدير الأخطار والسلامة والبئية ، إلا أنه تكلفة قياس هذه الخاصية تحول دون ذلك، كما ندرة القيم البيانية تحول دون ذلك.

لقد أعطى نهج مساهمات المجموعات المتداخلة (group-interaction contribution)(GIC)الذي يعتمد على مبدأ ماريو–موريخون وباردیلو– فونتيفيلا 1999(Marrero-Morejon and Pardillo - fonntdevila) وباردیلو و غونزاليز–روبيو(Pardillo and Gonzalez – rubio) ومقدم وزملائها (Mokadem et *al.*) طريقة بسيطة خطية ولا خطية لتقدير قيم الخاصية الجرعة المميتة 50% للمبيدات.

في هذه الدراسة تم الإعتماد على قاعدة معطيات تتكون من 628 مركب كيميائية من مبيدات منها 303 مبيد حشري (Insect)بتأثير Neurotoxicity، 85 مبيد فطري (furgi) بتأثير Biosynthesis inhibition و240 مبيد نباتي (plant) مقسمة على 3 تأثيرات: 88 مركب بتأثير Biosynthesis inhibition، و76 مركب بتأثير Growthre gulationو76 عدد بتأثير Phdosynthesis modulation.

وأظهرت النتائج أن هذه الطريقة تمثل بديلا ممتازا للتقنيات الكلاسيكية و إذ تم الحصول على المعاملات الإحصائية منها معامل الارتباط (R^2) خطي0.782،0.757، 0.840، وغير خطي 0.866، 0.911 على توالي وكذلك الخطأ النسبي (AARD%)23.769، 5.157، 3.078، 3.391، 2.497 على الترتيب.

هذه الأخيرة تعطي قيمة جد جيدة لهذه الدراسة حيث كانت الدراسة الأفضل والأقرب من الدراسات السابقة لمارتن و زملاؤه (Marttin et *al.*) [1]. و هذا ما لا نجده في الطرق التقليدية الواردة في الدراسات السابقة.

المراجع:

[1]T. M. Martin, C. R. Lilavois and M. G. Barron, Prediction of pesticide acute toxicity using twodimensional chemical descriptors and target
species classification, jornal homepage : http://www.tandefonline.com/loi/gsar20, 2017.

الإنتاج العلمي

الإنتاج العلمي :

مداخلات دولية

Mokadem Khadra, Belfar Mohemed Lakhdar, Zerrouki Hayat, **Ati Dounia, Hamel Karima**, Abed Abdulqader Saad, Ghiaba Zineb, Khouildat Salma, Ghiaba Zineb, Djari Lebna, A Simple Group-Interaction Contribution Method for estimating the toxicity of pesticide, Euro-Mediterranean Conference for Environmental Integration, (EMCEI 2021),10th-13th June 2021, souse, tunisia.

نشرية

Mokadem Khadra, Belfar Mohemed Lakhdar, Zerrouki Hayat, **Ati Dounia, Hamel Karima**, Abed Abdulqader Saad, Ghiaba Zineb, Khouildat Salma, Ghiaba Zineb, Djari Lebna, A Simple Group-Interaction Contribution Method for estimating the toxicity of pesticide, Euro-Mediterranean Conference for Environmental Integration, Euro-Mediterranean Journal for Environmental Integration (EMJEI), SCOPUS/SCIMAGO.

(SPRINGER ASTI SERIES), (accepte).

الملاحق

الملحق

الجدول1:مساهمة المجموعات المداخلة نظام الحشرات Insect بتأثير السمية العصبيةNeurotoxicity

interactions	$\Delta C_j(k)$
CH3 et -CH2	mo2kadem@gmail.com
CH3 et >CH-	
CH3 et >C<	
CH3 et >C=	
CH3- et -CH=	
CH3 et -CO-	
CH3 et -CO2-	
CH3 et -O-	
CH3 et -PO3	
CH3 et SO	
CH3 et -S-	
CH2- et -CH2-	
CH2- et >CH-	
CH2- et >C<	
CH2- et -CH=	
CH2- et >C=	
CH2- et -CO-	
CH2- et -CO2-	
CH2- et -O-	
H2C et –Br	
H2C et –CL	
H2C- et -S-	
CH2- et SO	
CH2 et SO2	
CH2 et SO3	
CH2 et SO4	
CH2- et PO3	
>CH- et >CH-	
>CH- et >C<	
>CH- et-HC=	
>CH- et >C=	
>CH- et -CO-	
>CH- et -CO2-	
>CH- et -S-	
>CH- et -SO2-	
>CH- et -O-	
>CH- et Cl	
>CH- et >N-	
>CH- et NO2	
>HC- et F	
>HC- et Br	
>CH- et PO3	
>C< et >C<	
>C< et -HC=	
>C< et >C=	
>C< et -CO-	
>C< et -CO2-	
>C< et -O-	
>C< et -S-	
>C< et –Cl	
>C< et >N-	
>C< et F	
>C< et Br	
H2C= et -CH=	
H2C= et >C=	
-HC= et -HC=	
-HC= et >C=	
-HC= et -CO-	
-HC= et -CO2	
-HC= et -O-	
-HC= et -Cl	
-HC= et -Br-	
-HC= et S	
-HC= et NO2	
>C= et > C=	
>C= et -CO-	
>C= et -CO2	
>C= et –Cl	
>C= et -O-	
>C= et >N-	
>C= et -S-	
>C= et -F-	
>C= et -I-	
>C= et -SO2	
>C= et NO2	
>C= et Br	
>C= etPO2	
>C= etPO3	
>C= et SO3	

ΞC et -N=	
ΞC et >C=	
ΞC et CH2	
CHΞ et ΞC	
>CH- et Ξ C	
C Ξ et ΞCH	
CΞ et ΞN	
N= et =N-	
N= et -NO2-	
N= et -PO3-	
N= et -CO2-	
N= et -CO-	
N= et =C<	
N= et =HC-	
N= et -CH-	
>N- et =HC-	
>N- et H	
>N- et CH3	
>N- et -CH2-	
>N- et =N-	
>N- et -O-	
>N- et -CO2	
>N- et POF	
>N- et -CO-	
>N- et PO	
>N- et -S-	
>N- et PO4	
N et SO2	
H- et -S-	
H- et -O-	
S et CO	
-O- et PO	

PO2S2 et -CH2	
PO2S2 et >C=	
PO2S2- et >HC-	
PO2S2 et -CH3	
PO4- et -CH3	
PO4 et >C=	
PO4 et CH2	
PO4 et >C=	
PO4- et -CH=	
POS3 et -CH2-	
PO3S et -CH3	
PO3S et -CH2-	
PO3S et -CH<	
PO3S et =C<	
PO3S et =N-	
PO3S et N-	
PO2F et CH3	
PO3F et >CH-	
PO2S etCH3	
PO2S et H	
PO2S etCH2	
PO2S et=C<	
PO2S et CL	
PO2S et >N-	
PO2S et - O-	
PO2S et >HC-	
PS2O et CH2	
PS2O et CH3	
PS2 et H	

الجدول2: مساهمة المجموعات المداخلة نظام الفطريات Fungiذو تأثير تثبيط التخليق الحيوي Biosynthesis inhibition

interactions	$\Delta C_j(k)$
CH3 et >CH-	
CH3 et >C<	
CH3 et >C=	
CH3- et -CH=	
CH3 et -CO-	
CH3 et -CO2-	
CH3 et -O-	

CH2- et -CH2-	
CH2- et >CH-	
CH2- et >C<	
CH2- et -CH=	
CH2- et >C=	
CH2- et -CO-	
CH2- et -CO2-	
CH2- et -O-	

H2C et –CL	
H2C- et -S-	
>CH- et >CH-	
>CH- et >C<	
>CH- et >C=	
>CH- et -CO-	
>CH- et -CO2-	
>CH- et -O-	
>CH- et >N-	
>HC- et Br	
>C< et >C<	
>C< et >C=	
>C< et -CO-	
>C< et -O-	
>C< et –Cl	
>C< et >N-	
>C< et F	
H2C= et -CH=	
H2C= et >C=	
-HC= et -HC=	
-HC= et >C=	
-HC= et -CO-	
-HC= et -CO2	
-HC= et -O-	
-HC= et -Cl	
-HC= et S	
>C= et > C=	
>C= et -CO-	
>C= et -CO2	
>C= et –Cl	
>C= et -O-	
>C= et >N-	
>C= et -S-	

>C= et -F-	
>C= et =S	
>C= et NO2	
ΞC et >C=	
ΞC et CH2	
CHΞ et ΞC	
>C< et Ξ C	
C Ξ et ΞCH	
CΞ et ΞN	
N= et =N-	
N= et -O-	
N= et -CO-	
N= et =C<	
N= et =HC-	
>N- et =HC-	
>N- et H	
>N- et CH3	
>N- et -CH2-	
>N- et =N-	
>N- et -CO2	
>N- et -CO-	
>N- et -S-	
N et SO2	
H- et -O-	
S et CO	
PO2S2 et -CH2	
PO2S2 et >C=	
PO4 et CH2	
PO4 et >C=	
PO3S et -CH3	
PO3S et -CH2-	
PO3S et -CH<	
PO3S et =C<	

الجدول3: جدول نظام النباتاتPlantتأثير تثبيط التخليق الحيويBiosynthesis inhibition

interactions	$\Delta C_j(k)$
CH3 et >CH-	
CH3 et >C<	
CH3 et >C=	
CH3- et -CH=	
CH3 et -CO-	
CH3 et -CO2-	
CH3 et -O-	

CH2- et -CH2-	
CH2- et >CH-	
CH2- et >C=	
CH2- et -CO-	
CH2- et -CO2-	
CH2- et -O-	
H2C et -CL	
H2C- et -S-	

CH2 et SO2	
CH2- et PO3	
>CH- et >CH-	
>CH- et >C<	
>CH- et >C=	
>CH- et -CO-	
>CH- et -CO2-	
>CH- et -S-	
>CH- et -O-	
>CH- et >N-	
>C< et >C=	
>C< et -CO-	
>C< et -CO2-	
>C< et -O-	
>C< et -S-	
>C< et –Cl	
>C< et >N-	
>C< et F	
H2C= et -CH=	
H2C= et >C=	
-HC= et -HC=	
-HC= et >C=	
-HC= et -CO-	
-HC= et -CO2	
-HC= et -O-	
-HC= et -Cl	
-HC= et S	
>C= et > C=	
>C= et -CO-	
>C= et -CO2	
>C= et –Cl	
>C= et -O-	
>C= et >N-	

>C= et -S-	
>C= et -F-	
>C= et =S	
>C= et -SO2	
>C= et NO2	
>C= et SO3	
CHΞ et ΞC	
>C< et Ξ C	
C Ξ et ΞCH	
N= et -O-	
N= et -CO-	
N= et =C<	
N= et =HC-	
>N- et =HC-	
>N- et H	
>N- et CH3	
>N- et -CH2-	
>N- et -O-	
>N- et -CO2	
N et -Br	
>N- et -CO-	
>N- et Cl	
N et SO2	
H- et -O-	
H- et -PO3-	
H et -CO2-	
S et CO	
PO2S2 et -CH2	
PO2S2- et >HC-	
PO2S2 et -CH3	
PO2S etCH2	
PO2S et=C<	
PO2S et >N-	

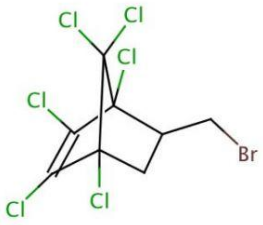
الجدول4: مساهمة المجموعات المداخلة نظام النباتاتPlantتأثير تنظيم النموGrowthregulation

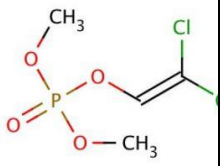
interactions	$\Delta C_j(k)$
CH3 et -CH2	mo2kadem@gmail.com
CH3 et >CH-	
CH3 et >C<	
CH3 et >C=	
CH3 et -CO-	
CH3 et -CO2-	
CH3 et -O-	
CH2- et -CH2-	
CH2- et >CH-	
CH2- et >C<	
CH2- et -CH=	
CH2- et >C=	
CH2- et -CO-	
CH2- et -CO2-	
CH2- et -O-	
H2C et -CL	
H2C- et -S-	
CH2 et SO2	
CH2- et PO3	
>CH- et >CH-	
>CH- et >C<	
>CH- et >C=	
>CH- et -CO2-	
>CH- et -O-	
>CH- et Cl	
>C< et -HC=	
>C< et >C=	
>C< et -CO2-	
>C< et -O-	
>C< et -SO2-	
-HC= et -HC=	
-HC= et >C=	
>C= et > C=	
>C= et -CO2	
>C= et -Cl	
>C= et -O-	
>C= et >N-	
>C= et -S-	
>C= et -F-	
>C= et -I-	
>C= et =S	
CΞ et ΞN	
N= et =N-	
N= et =C<	
>N- et H	
>N- et CH3	
>N- et -CH2-	
>N- et -CO2	
>N- et -CO-	
H- et -O-	
H et -CO2-	
S et S	
PS3 et CH2	

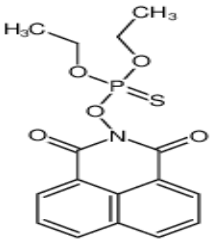
الجدول5 : مساهمة المجموعات المداخلة نظام النباتات Plantتأثير تعديل التمثيلالضوئي Phdosynthesis modulation

interactions	$\Delta C_j(k)$
CH3 et >CH-	
CH3 et >C<	
CH3 et >C=	
CH3 et -CO-	
CH3 et -CO2-	
CH3 et -O-	
CH3 et -SO3	
CH3 et -S-	
CH2- et -CH2-	
CH2- et >CH-	
CH2- et >C<	
CH2- et >C=	
CH2- et -CO-	
CH2- et -CO2-	
CH2- et -O-	
H2C- et -S-	
CH2 et SO2	
>CH- et >CH-	
>CH- et -CO-	
>CH- et -O-	
>CH- et >N-	
>C< et >C=	
>C< et -Cl	
>C< et >N-	
>C< et F	
-HC= et -HC=	
-HC= et >C=	
>C= et > C=	
>C= et -CO-	
>C= et -CO2	
>C= et -Cl	
>C= et -O-	
>C= et >N-	
>C= et -S-	
>C= et -F-	
>C= et -I-	
>C= et =S	
>C= et -SO2	
>C= et NO2	
>C= et Br	
ΞC et >C=	
CHΞ et ΞC	
>C< et Ξ C	
CΞ et ΞC	
CΞ et ΞN	
N= et =N-	
N= et -NO2-	
N= et -PO3-	
N= et -O-	
N= et -CO2-	
N= et -CO-	
N= et =C<	
N= et =HC-	
N= et -CH-	
>N- et =HC-	
>N- et H	
>N- et CH3	
>N- et -CH2-	
>N- et =N-	
>N- et -O-	
>N- et -CO2	
N et N2	
>N- et -CO-	
N et SO2	
H- et -O-	
H et -CO2-	
-SO2- et -O-	

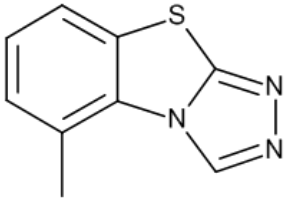
الجدول6: امثلة تطبيقي لتقدير السمية المبيدات لنظام حشري

LogLD50=2.26+∑iNiCi logLD50(pred)= 4,09 , AARD (%)=0%			
Benzenesulfonic acid, 4-chlorophenyl ester Cas N° : 1715-40-8 logLD50(exp)= 4,09			
Interactions	N_i	C_i	$N_i * C_i$
CH2- et >CH-	1	1.499	1.499
CH2- et > C<	1	-5.842	-5.842
H2C et -Br	2	1.771	3,542
CH- >C< et >	1	-0.089	-0.089
C< et >C<>	2	0.64	1,28
C< et >C=>	2	-0.007	-0.014
C< et -Cl>	4	-0.204	-0,816
C= et > C=>	1	0.687	0.687
C= et -Cl>	2	-0.466	-0.932
>S- et -CO-	0	0	0

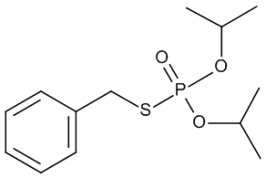
LogLD50=2.26+∑iNiCi logLD50(pred)= 1,23 , AARD (%)=0%			
Phosphoric acid, 2,2-dichloroethenyl dimethyl ester Cas N° : 62-73-7 logLD50(exp)= 1,23			
Interactions	N_i	C_i	$N_i * C_i$
= -HC= et >C	1	1.499	1.499
>C= et –Cl	2	-5.842	-11,684
PO4- et -CH3	2	1.771	3,542
PO4- et =CH-	1	-0.089	-0.089

LogLD50=2.26+∑iNiCi logLD50(pred)= 2,698 , AARD (%)=0%			
1H-Benz(de)isoquinoline-1,3(2H)-dione, 2-((diethoxyphosphinothioyl)oxy)- Cas N°: 2668-92-0 logLD50(exp)= 2,698			
Interactions	N_i	C_i	$N_i * C_i$
CH3 et -CH2	2	2.528	5,056
=-HC= et -HC	4	-0.786	-3,144
-HC= et >C=	4	0.406	1.624
C= et > C=>	3	-0.792	2,376
C= et -CO->	2	0.091	0,182
>N- et -CO-	2	-0.205	-0,41
PO3S et -CH2-	2	2.487	4.974
PO3S et N-	1	-2.61	-2.61

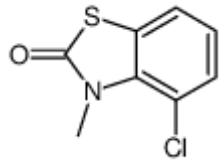
الجدول7: امثلة تطبيقي لتقدير السمية المبيدات لنظام للفطريات

LogLD50=3.119+∑iNiCi logLD50(pred)=3.13, AARD (%)=0%	
-5Methyl-1,2,4-triazolo(3,4-b)benzo-1,3-thiazole Cas N° : 41814-78-2 logLD50(exp)= 2,397	

Interactions	N_i	C_i	N_i* C_i
CH3 et >C=	1	0,325-	0,325-
=HC- et -HC=	2	0,046	0,92
= -HC= et >C	2	0,112-	-0,224
C= et > C= >	2	0,162	0,32
< > C= et -N	2	0,17	0,36
N= et =N-	1	1,128-	1,128-
N= et =HC-	2	0,497	0,994
<N- et =HC-	1	0,008	0,008

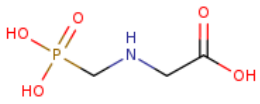
LogLD50=3.119+∑iNiCi logLD50(pred)=3.13, AARD (%)=0%	
Phosphorothioic acid, S-benzyl O,O-diisopropyl ester Cas N° : 26087-47-8 logLD50(exp)=2.74	

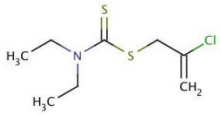
Interactions	N_i	C_i	N_i* C_i
CH3 et >CH-	4	0,205 -	1.499
H2C- et >C=	1	0,023	0,023
= -HC= et -HC	4	0,046	1,84
=-HC= et >C	2	0,112-	-0,224
PO3S et -CH2-	1	0,282-	0,282-
PO3S et -CH>	2	0,651	1,23

LogLD50=3.119+∑iNiCi logLD50(pred)=3.13, AARD (%)=0%	
3)2H)-Benzothiazolone, 4-chloro-3-methyl- Cas N°: 63755-05-5 logLD50(exp)= 2,398	

Interactions	N_i	C_i	N_i* C_i
-CH3 et >C=	1	0,325-	2.528
=-HC= et -HC	2	0,046	-0.786
=-HC= et >C	2	0,112-	1.624
C= et > C=>	2	0,162	6.336
> C=et >N -	2	0,17	0.091
N= et =N-	1	1,128-	-0.41
N= et =HC-	2	0,497	4.974
<N- et =HC-	1	0,008	-5.22

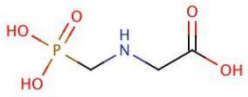
الجدول8: امثلة تطبيقي لتقدير السمية المبيدات النباتية لتأثير نظام تثبيط التخليق الحيوي (Biosynthsis inhibition)

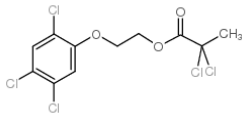
LogLD50=3.683+∑iNiCi logLD50(pred)= 3,68 , AARD (%)=0%			
LogLD50=361,969 /(3058,61+3.683+∑iNiCi) 3.683+∑iNiCi logLD50(pred)= 4,09, AARD (%)=0%			
Glycine, N-(phosphonomethyl)-Cas N° : 1071-83-6 logLD50(exp)= 4,09			
Interactions	N_i	C_i	$N_i * C_i$
CH2- et -CO2-	1	0,029	0,029
CH2- et PO3	1	1,544-	1,544-
>N - et H	1	0,19	0,19
>N- et -CH2	2	0,67	1,34
H- et -PO3-	2	0	0
H et -CO2-	1	0,02-	0,02-

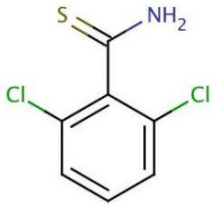
LogLD50=3.683+∑iNiCi logLD50(pred)= 2.975, AARD (%)=0%			
LogLD50=361,969 /(3058,61+3.683+∑iNiCi) 3.683+∑iNiCi logLD50(pred)= 2.975, AARD (%)=0%			
Carbamodithioic acid, diethyl-, 2-chloro-2-propenyl ester (9CI) Cas N° : 95-06-7 logLD50(exp)= 1,23			
Interactions	N_i	C_i	$N_i * C_i$
CH2- et >C=	1	0,194	0,194
H2C- et -S-	1	1,25-	1,25-
H2C= et >C=	1	0,194	0,194
>C= et -Cl	1	0,274	0,274
>C= et >N-	1	0,249	0,249
>C= et -S	1	0	0
>N- et -CH2-	2	0,675	1,35

LogLD50=3.683+∑iNiCi logLD50(pred)= 2,879, AARD (%)=0%			
LogLD50=361,969 /(3058,61+3.683+∑iNiCi) 3.683+∑iNiCi logLD50(pred)= 2,879, AARD (%)=0%			
Benzene carbothio amide, 2,6-dichloro- (9CI) Cas N°:1918-13-4 logLD50(exp)= 2,879			
Interactions	N_i	C_i	$N_i * C_i$
=-HC= et -HC	2	70,00-	0,014-
-HC= et >C=	2	0,204-	0,408-
C= et > C=>	2	0,437-	0,874-
>C= et -Cl	2	0,274	0,548
C= et -CO->	2	1,321	2,642
>C= et >N-	1	0,249	0,249
> C= et –S-	1	0	0
>N- et H	2	0,19	0,38

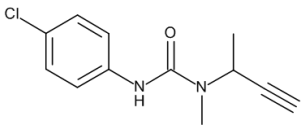
الجدول9: امثلة تطبيقي لتقدير السمية المبيدات النباتية لتأثير نظام تنظيم النمو (Growth rgulation)

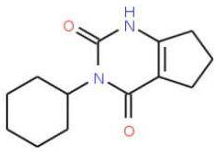
LogLD50=2.989+∑iNiCi logLD50(pred)=3.477, AARD (%)=0%			
Glycine, N-(phosphonomethyl)- Cas N° : 1071-83-6 logLD50(exp)= 4,09			
Interactions	N_i	C_i	$N_i * C_i$
CH2- et -CO2-	1	0,029	1.499
CH2- et PO3	1	1,544-	-5.842
>N - et H	1	0,19	3.542
>N- et -CH2	2	0,67	-0.178
H- et -PO3-	2	0	0
H et -CO2-	1	0,02-	0.028

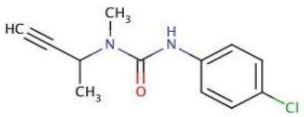
LogLD50=2.989+∑iNiCi logLD50(pred)=3 , AARD (%)=0%			
Propionic acid, 2,2-dichloro-, 2-(2,4,5-trichlorophenoxy)ethyl esterCas N° : 136-25-4 logLD50(exp)= 3			
Interactions	N_i	C_i	$N_i * C_i$
CH3 et > C<	1	0,194	1.499
CH2- et -CH2-	1	1,25-	-5.842
CH2- et -CO2-	1	0,194	0,0869
CH2- et -O-	1	0,274	-0.178
> C< et -CO2	1	0,249	1.28
-HC= et >C=	1	0	0
>N- et -CH2-	2	0,675	1.374

LogLD50=3.683+∑iNiCi logLD50(pred)= 2,879, AARD (%)=0%			
Benzene carbothio amide, 2,6-dichloro- (9CI)Cas N°: 1918-13-4 logLD50(exp)= 2,879			
Interactions	N_i	C_i	$N_i * C_i$
=-HC= et -HC	2	70,00-	-0,014
-HC= et >C=	2	0,204-	-0,408
C= et > C=>	2	0,437-	-0,874
>C= et -Cl	2	0,274	0,548
C= et -CO->	2	1,321	2,642
>C= et >N-	1	0,249	0,249
> C= et –S-	1	0	0
>N- et H	2	0,19	0,38

الجدول 10: مثال تطبيقي لتقدير السمية المبيدات النباتية لنظام تعديل التمثيل الضوئي(Photosynthesis modulation)

LogLD50=3.503+∑iNiCi logLD50(pred)=3.602, AARD (%)=0%			
LogLD50=37,687(1-e$^{(-0,028X_1)}$) logLD50(pred)= 3,253 , AARD (%)=0%			
Urea, 3-(p-chlorophenyl)-1-methyl-1-(1-methyl-2-propynyl)- Cas N° : 3766-60-7 logLD50(exp)= 3,253			
Interactions	N_i	C_i	N_i* C_i
CH3 et >CH- -	1	0,486	0,486
CH- et >N- >	1	1,102-	1,102-
C= et > C=>	2	0,824-	1,648-
-HC= et >C=	4	-0,792	3,168
>C= et -Cl	1	1,723	1,723
>C= et >N-	1	0,205-	0,205-
CHΞ et ΞC	2	0,47	0,94
>N - et H	1	0,26-	0,26-
>N - et –CH3	1	0,118	0,118
<N- et -CO-	2	0,205	0,41

LogLD50=3.503+∑iNiCi logLD50(pred)=3.602, AARD (%)=0%			
LogLD50=37,687(1-e$^{(-0,028X_1)}$) logLD50(pred)= 4,041, AARD (%)=0%			
1H-Cyclopentapyrimidine-2,4(3H,5H)-dione, 6,7-dihydro-3-cyclohexyl- Cas N° : 2164-08-1 logLD50(exp)= 4,041			
Interactions	N_i	C_i	N_i* C_i
CH2- et -CH2-	6	0,1-	0,6-
CH2- et >CH--	2	0,516	1,32
CH2- et >C=-	2	1,646	3,292
CH- et >N- >	1	1,102-	1,102-
C= et > C=>	1	0,824-	0,824-
C= et -CO->	1	1,408-	1,408-
>C= et >N-	1	0,205-	0,205-
>N - et H	1	0,26-	0,26-
>N- et -CO-	3	0,205	0,615

LogLD50=3.503+∑iNiCi logLD50(pred)=3.602, AARD (%)=0%			
LogLD50=37,687(1-e$^{(-0,028X_1)}$) logLD50(pred)= 3,041, AARD (%)=0%			
1H-2,1,3-Benzothiadiazin-4(3H)-one, 3-(1-methylethyl)-, 2,2-dioxide Cas N°:3766-60-7 logLD50(exp)= 3,041			
Interactions	N_i	C_i	N_i* C_i
CH3 et >CH-	2	0,486	1,218
CH- et >N- >	1	1,102-	1,102-
-HC= et -HC=	3	0,406	1,218
-HC= et >C=	2	-0,792	-1,584
C= et > C=>	1	0,824-	0,824-
> C= et -CO-	1	1,408-	1,408-
>C= et =N-	1	-0,241	-0,241
>N- et –CO-	1	0,205	0,205
>N- et –SO2	2	1,283	2,566