

작물 보호제로서 살균제와 살충제의 활성 성분에 대한 물리-화학 파라미터의 범위

성낙도* · 송선섭¹

충남대학교 농업생명과학대학 응용생물화학부, ¹한국삼공(주)

(2003년 5월 7일 접수, 2003년 6월 19일 수리)

농업용 살균제와 살충제로서의 활용성 진단과 예측평가 자료로 사용하기 위하여 상용화 된 살균제 133품목과 살충제 152품목의 활성 성분들에 대하여 소수성(LogP), 쌍극자능율(DM), HOMO 및 LUMO 에너지, molar refractivity(MR), polarizability(Pol), van der Waals 분자 표면적 및 부피(Vol), 분자량 및 수화 에너지(hydration energy) 등, 10 가지의 다양한 물리-화학 파라미터들을 계산하였다. 그리고 살균제와 sterol 생합성 저해제(DMI: demethylation inhibitor) 및 살충제와 acetylcholine esterase 저해제(AChE)들이 가지는 특정한 물리-화학 파라미터들의 범위 값을 설정하였다. 그 결과에 기초하여 다양한 화합물들이 작물 보호제로서 살균제와 살충제로서의 활용 가능성이 예측될 것으로 판단되었다.

Key words: crop protection agents, fungicides, insecticides, physicochemical parameters, diagnosis & evaluation system

서 론

새로운 약제의 개발 방법으로 활용되는 정량적 구조-활성상관(QSAR) 기법¹⁾은 물리-유기화학을 기본으로 하는 약품 개발 수단이다.²⁾ 이 방법은 화합물의 구조 변화에 따른 약리작용의 변화를 정량적으로 분석 할 뿐만 아니라, 분자 구조와 물리-화학적 성질과의 상관 관계식을 유도하여 생물활성이 가장 큰 화합물을 예측하므로써 신약 개발 연구에 가장 효율적으로 이용된다.³⁾

QSAR 기법에서 약제와 수용체간의 상호작용으로 설명되는 생물활성은 주로 전자 전달효과와 입체효과 그리고 소수성 효과 등, 3가지 물리-화학적 파라미터들에 의하여 결정된다.³⁾ 전보에서는⁴⁾ 상용화된 제초제 245품목의 활성 성분들이 가지는 소수성(logP)⁵⁾ 쌍극자 능율(DM), HOMO 에너지 및 LUMO 에너지, MR(molar refractivity), Pol(polarizability), van der Waals 분자 표면적 및 van der Waals 분자부피, 분자량(M.Wt.) 및 수화 에너지(hydration energy) 등, 10가지의 물리-화학적 파라미터⁶⁾들을 계산하고 작용 기작별로 각 파라미터의 범위를 도출하여 보고한 바 있다.

본 연구에서는 작물 보호제로서 상용중인 살균제 133품목과 살충제 152품목에 대하여⁶⁾ 앞서와 같은 10가지의 물리-화학적 파라미터들을 계산하고 그 분포 범위를 제시함으로써 알려지지 않았거나 다른 용도로 사용중인 다양한 화합물들에 대하여 농업용 살균제와 살충제로서의 이용 가능성 진단과 예측 시스템을 구축하여 활용하고자 하였으며 같은 분자량을 갖는 약에 대하여 계산한 물리-화학 파라미터를 비교하여 농약과의 약과의 판별 가능성을 시도하였다.

재료 및 방법

상용중인 농업용 살균제는 FRAC(Fungicide Resistance Action Committee)⁷⁾ 그리고 살충제는 IRAC(Insecticide Resistance Action Committee)⁸⁾의 작용기작 분류 기준에 따라 살균제 133품목과 살충제 152품목을 각각 선정하였다.⁶⁾ 선정된 활성 성분들의 구조를 확인하고⁹⁾ 1개의 성분 당, 소수성(logP: hydrophobicity)⁵⁾, 쌍극자 능율(DM: dipole moment, debye), 최고 점유 분자궤도(HOMO: highest occupied molecular orbital) 에너지(e.V) 및 최저 점유 분자궤도(LUMO: lowest occupied molecular orbital) 에너지(e.V: electron volt), 몰라 굴절상수(MR: molar refractivity, cm³/mol), 분극율(Pol: polarizability, Å³), van der Waals 분자 표면적(surface area, Å²) 및 van der Waals 분자부피(Vol: volume, cm³), 분자량(M.Wt., amu.) 및 수화 에너지(Hy. E.: hydration energy, Kcal/mol.) 등, 10종의 물리-화학 파라미터를 Hyperchem 프로그램으로 계산하여¹⁰⁾ 전보와 같은 방법으로 파라미터 사이의 변별력을 높이기 위하여 85% 분포 범위를 설정하였다.⁴⁾

농업용 살균제와 살충제의 분자량 중 85% 범위의 분자량(살균제: 209~412 amu. 및 살충제: 183~477 amu.)을 가지는 의약¹¹⁾을 무작위로 선별하고 10가지의 물리-화학 상수를 계산하여 하나의 물리-화학 파라미터 당, 설정한 85%의 분포 범위에 포함된 약물의 품목수를 백분율(%)로 환산하여 농업용 살균제와 살충제들을 의약품들의 물리-화학 파라미터들과 상호 비교하였다.

결과 및 고찰

작용기작에 의한 분류. 농업용 살균제는 병원체에 대한 작용 부위에 따라 호흡 저해제(SH 저해제, 전자 전달 저해제, 비공역제, 산화적 인산화 저해제 및 TCA회로 저해제 등), 생합성 저해제(단백질, 핵산, chitin, tubulin, melanin, sterol 및

*연락처

Phone: 82-42-821-6737; Fax: 82-42-825-3306

E-mail: ndsung@cnu.ac.kr

Table 1. Classification of fungicides and insecticide according to the mode of actions

Class	Group	Mode of actions	Chemical Family
Fungicide (133) ¹⁾	F-1 ²⁾	Inhibition of C14-demethylation in sterol biosynthesis (DMI), (32).	Imidazoles (4), Piperazine (1), Pyrimidines (3), Triazoles (24).
	F-2 ²⁾	Inhibition of complex III of fungal respiration: ubiquinol oxidase, (8).	Methoxyacrylates (2), Imidazolinone (1), Methoxycarbamate(1), Oximino acetates (2), Oximino-acetamide (1), Oxazolidinediones (1).
	F-3 ²⁾	Inhibition of succinate dehydrogenase, (7).	Oxathiins (7).
Insecticide (152) ¹⁾	I-1 ³⁾	Acetylcholine esterase (AChE) inhibition, (90).	Carbamates (17), Carbamoyltriazole (1), Organophosphorus (64), Oxime carbamates (8).
	I-2 ³⁾	Inhibit chitin biosynthesis, (10).	Benzoylureas (10).
	I-3 ³⁾	Acetylcholine receptor agonis- tsts/antagonists, (9).	Neonicotinoids (2), Nitrimethylene (3), 2-dimethylaminoprop-ane-1,3-dithiols (3), Other (1).

¹⁾Numberals in parenthesis are number of compounds., ²⁾Code of FRAC., ³⁾Code of IRAC.

Table 2. The range of physicochemical parameters for fungicides and sterol biosynthesis inhibitors (DMIs)

Parameters	Fungicides ¹⁾	Fungicides ²⁾	DMIs (F-1) ²⁾
OlogP ³⁾	-4.97~5.83	-1.10~3.80	-0.20~2.50
ClogP ⁴⁾	-4.97~7.60	-1.09~3.75	-0.09~2.51
DM (Debye)	0.00~13.63	1.60~7.60	2.10~5.50
MR (Cm ³ /mol)	25.13~126.33	60.0~107.0	82.0~104.0
Pol (Å ³)	9.36~52.00	22.0~40.0	28.0~37.0
HOMO (eV) ⁵⁾	-11.0950~-5.750	-10.330~-6.820	-10.0700~-7.3600
LUMO (eV) ⁵⁾	-5.2670~-2.4150	-2.6500~-0.1800	-1.4600~-0.0200
Vol (Cm ³) ⁶⁾	132.99~1327.50	564.0~990.0	760.0~952.0
Mass (amu)	100.00~582.56	210~412	292~377
Surface area (Å ²)	113.70~488.95	203.0~358.0	263.0~337.0
Hy.E (kcal/mol) ⁷⁾	-771.42~541.47	-14.03~122.64	-9.04~56.74

¹⁾100% full range, ²⁾85% range, ³⁾observed value, ⁴⁾calculated value, ⁵⁾1 electron volt (eV): 23.06 Kcal/mol, ⁶⁾van der Waals volume, ⁷⁾hydration energy.

glycerophospholipid 생합성 저해제 등) 및 기주 식물의 저항성 증대제로 구분되며⁷⁾ 성분량으로 133품목의 살균제를 FRAC의 작용기작(mode of action)에 따라 F1-F25로 분류된다.¹²⁾

살균제 152품목에 대한 작용기작 별 활성성분을 살펴보면 ergosterol 생합성 저해제(DMI: demethylation inhibitor)가 32성분으로 24.1%, fungal respiration 중 Complex III 저해제가 8성분으로 6.0%를 차지하였으며 multi site activity 저해제 13성분(9.8%) 그리고 작용기작이 규명되지 않은 품목이 11성분(8.3%)의 순으로 많은 비율을 차지하였다. 그러나 여기에서는 multi site activity 저해제를 제외한 가장 많은 활성성분을 포함하고 있는 3가지 유형의 작용기작(F1-F3)과 그에 따르는 유도체들을 분류하여 Table 1에 제시하였다.

살충제를 작용기작 면에서 분류하면 신경전달(전위 의존형 sodium 및 calcium channels) 저해, 신경 전달물질 ACh (acetylcholine) 모방체, AChE(acetylcholine esterase) 저해제, 신경전달 물질 octopamine 모방체)저해제, 에너지 생산 저해제, 성장 조절제(호르몬 교란 저해제, chitin 생성저해제, 단백질 응고제), 행동 억제제(성 페로몬, 유인제, 기피제) 등으로 구분하며 27성분량으로 152품목의 살충제를 IRAC 기준에 따라⁹⁾ 22개로 분류한 것들 중에서 가장 많은 활성성분을 포함하고 있는 3가지 유형의 작용기작(I-1~I-3)과 그에 따르는 유도체들을 분류하여 Table 1에 요약하였다. 이에 따르면 살충제는 AChE 저

해제가 90성분 59.2%로 가장 많은 비율을 차지하였으며 그 다음으로 chitin biosynthesis 저해제는 10성분으로 6.5%를 각각 차지하였다.

살균제의 물리-화학 파라미터. 살균제 133품목의 활성 성분들에 대하여 계산된 소수성(ClogP) 및 관측된 소수성(OlogP), 쌍극자능율(DM; Debye), HOMO 및 LUMO 에너지, MR상수, 분극율(Pol), van der Waals 분자 표면적(Å²) 및 분자부피(Vol; cm³), 분자량(amu) 및 수화 에너지(Kcal/mol) 등, 10가지의 물리-화학적 파라미터들을 Table 2에 정리하였으며 각 상수들에 대한 정의는 전보와 같다.⁴⁾ 특히, 이들 파라미터 중에서 logP 상수는 약제의 생체내 침투와 이행에 관여하는 가장 중요한 성질의 척도로서⁵⁾ 상용화 된 살균제 64품목에 대하여 OlogP 값의 분포 범위는 -2.80~4.80이며 주로 2.00~4.30 영역에 분포하지만 제초제의 경우와 같이 살균제들은 약 3.0 부근에서 분포율이 가장 크다는 사실이 보고된 바 있다.¹³⁾

살균제들의 경우에 있어서 소수성 상수 이외에는 그 분포 범위에 대하여 보고된 바가 없다. 그러나 여기에서는 살균제들의 활성성분에 대한 소수성 상수는 물론, 가장 많은 유형의 저해양상을 나타내는 DMI 저해제(32품목)인 F-1계의 화합물에 대한 특정한 물리-화학 파라미터들의 분포 범위를 알아보고자 하였다. 그 시도의 일환으로 Table 2에 기초하여 각 파라미터의 수치 별 분포 비율(%)과의 관계를 나타낸 그림들로부터 변별

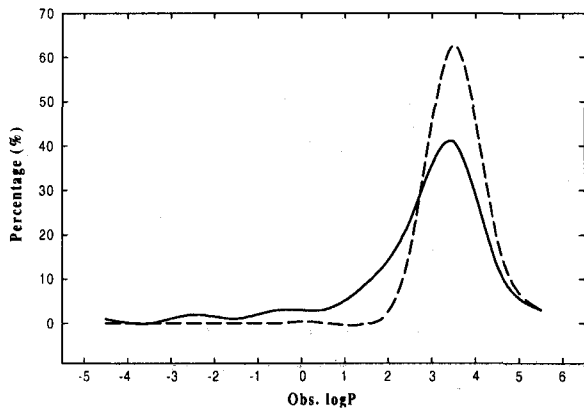


Fig. 1. The distribution ratio (%) for hydrophobicities (logP) of fungicides (—) and sterol biosynthesis (DMI) inhibitors (---).

력을 높이기 위하여 분포 비율이 높은 영역을 중심으로 전체 범위의 상한값 및 하한값에서 각 7.5%를 제외한 85% 분포 범위를 설정하였다.

살균제 중 DMI 저해제(F-1)인 imazail, perfurazoate 및 triflumizole 등의 소수성 상수는 3.0~4.0이었으나 benomyl, carbendazim, fuberidazole 및 thiabendazole 등, F-4계 화합물은 -2.0 이하로 극성이 큰 화합물이었다. 살균제들의 활성성분과 작용기작 중 가장 많은 유형의 저해 성분을 포함하는 DMI 저해제들의 물리-화학 파라미터는 유사한 분포 경향을 나타내었다. 예컨대, Fig. 1에서와 같이 logP상수와 분포 비율과의 관계로부터 소수성 상수의 분포 범위(OlogP: -4.97~5.83 및 ClogP: -4.97~7.59)는 넓게 분포되어 있으나 주로 2.0~4.50 사이에 높은 분포 비율을 나타내고 있다. 그러므로 가장 분포비율이 높은 구간을 택하여 분포 범위를 설정하였으며 그에 따른 85% 분포의 범위는 분포 비율이 낮은 영역의 하한값 만을 15% 제외시켜서 관측값과 계산값 두 경우, 모두 2.0~4.50 사이의 분포 비율을 나타내는 것으로 정하였다.

DMI 저해제들에 대한 85% 범위의 물리-화학 상수는 대략 다음과 같다. 즉, 쌍극자 능률값(DM); 2.10~5.50(debye), M_R 상수; 82.0~104.0(cm^3/mol), Pol. 상수; 28.0~37.0(\AA^3), HOMO 에너지; -10.~ -7.36(eV), 그리고 LUMO 에너지; -1.46~0.02(eV),

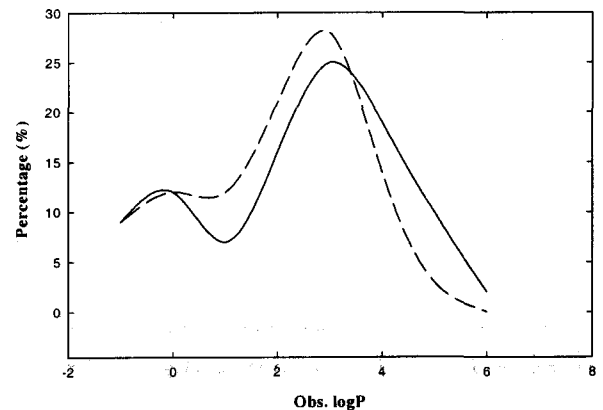


Fig. 2. The distribution ratio (%) for hydrophobicities (logP) of insecticides (—) and acetylcholine esterase (AChE) inhibitors (---).

van der Waals 분자 부피(Vol); 759~952(cm^3), 분자량; 292~377(amu) 그리고 van der Waals 분자 표면적은 263~337(\AA^2)의 범위를 각각 나타내었다. 이와 같이 모든 상수는 살균제와 제초제의 활성 성분들이 서로 유사하였으나 쌍극자 능률값의 경우에는 살균제의 활성 성분이 제초제의 그것보다 상한값이 약 4.60 debye 정도 작은 폭의 값을 나타내었다.

살충제의 물리-화학 파라미터. 살충제의 활성성분 152품목과 AChE 저해제(I-1)에 대한 물리-화학 파라미터 값을 계산한 결과는 Table 3과 같다. 또한, 살충제와 AChE 저해제에 대한 물리-화학 파라미터 별 분포 비율은 I-1 저해제가 90성분으로 59.2%를 점유하므로 살충제와 I-1계 두 제제의 분포비율은 그 경향이 유사함을 나타내었다.

살충제와 AChE 저해제(I-1)의 logP 값에 대한 범위는 Fig. 2에서 보는 바와 같이 -1.0~6.0 범위에 분포되어 있으며 살충제들의 물리-화학 파라미터에 대한 100% 분포범위는 대략 다음과 같다. 즉, 쌍극자 능률¹⁴⁾ 값의 범위는 0~15(debye), M_R 상수는 9~268 (cm^3/mol) 그리고 작용 기작이 아직 규명되지 않았거나 분류가 되지 않은 I-8계의 M_R 상수는 30 cm^3/mol 이하의 값으로 나타났다. Pol. 상수는 1.73~103.5(\AA^3), HOMO 에너지는 -12.8824~-2.8524(eV), LUMO 에너지는 살충제에서 -9.0654~1.1447(eV)의 범위이었으며 I-1계 중 organophosphorus

Table 3. The range of physicochemical parameters for insecticides and AChE inhibitors

Parameters	Insecticides ¹⁾	Insecticides ²⁾	AChE (I-1) ²⁾
OlogP ³⁾	-0.89~7.03	0.00~5.50	-0.03~4.40
ClogP ⁴⁾	-2.27~8.05	-0.26~4.34	-0.03~3.21
DM (Debye)	0.34~15.02	1.20~10.20	2.01~10.20
MR (Cm^3/mol)	9.01~268.08	48.0~121.0	50.0~97.0
Pol (\AA^3)	1.73~103.52	17.0~43.0	18.0~34.0
HOMO (eV) ⁵⁾	-12.8824~-2.8524	-10.1800~-7.1700	-9.9600~-7.5800
LUMO (eV) ⁵⁾	-9.0654~1.1447	-2.9300~0.1000	-3.0200~-0.3400
Vol (Cm^3) ⁶⁾	226.69~2102.68	550.0~1086.0	572.0~955.0
Mass (amu)	57.96~994.23	183~477	193~368
Surface rea (\AA^2)	72.03~807.88	190.0~384.0	202.0~341.0
Hy.E (kcal/mol) ⁷⁾	-146.78~166.93	-11.71~110.73	-11.71~109.70

¹⁾100% full range, ²⁾85% range, ³⁾observed value, ⁴⁾calculated value, ⁵⁾1 electron volt (eV); 23.06 Kcal/mol, ⁶⁾van der Waals volume, ⁷⁾hydration energy.

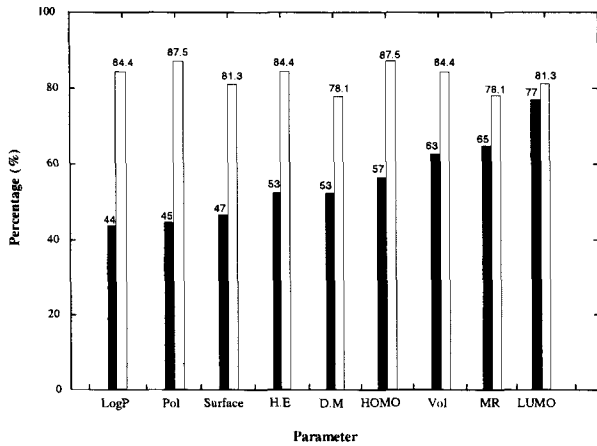


Fig. 3. Difference of physicochemical parameters between medicinal drug and DMIs inhibitor of fungicides. (■: Medicinal drug, □: Fungicide).

계 화합물은 $-4\sim-2$ (eV) 그리고 carbamate와 oxime carbamate 계는 $-2.0\sim-0.0$ (eV)의 범위를 나타내므로서 화합물간에 차별화를 볼 수 있었다. 또한, van der Waals 분자 부피는 $226.7\sim 2102.7$ (cm^3)의 범위이었으며 acetylcholine receptor modulator의 I-16계와 avermectins의 I-10계 화합물은 1800 cm^3 이상 그리고 작용 기작이 규명되지 않았거나 분류가 되지 않은 I-8계에 속하는 화합물은 300 cm^3 이하 이었다. 분자량(mass)은 $58.0\sim 994$ (amu), van der Waals 분자 표면적은 $72\sim 807$ (\AA^2)의 범위를 나타내었으며 I-1계는 $200\sim 350$ (\AA^2)의 범위이고 I-8계는 130.2 (\AA^2) 이하이었다.

I-8계 화합물인 aluminum phosphide, chloropicrin, methyl bromide 및 sulfuryl fluoride는 MR, van der Waals 분자 부피¹⁵⁾ 및 분자 표면적, 분자량 등에서 살충제가 가지는 물리-화학 파라미터 범위의 값 중 비교적 낮은 값의 범위를 나타내었다. 그리고 I-10 계통의 화합물인 avermectin과 emamectin은 분자부피, 분자량 및 분자 표면적 등은 살충제가 가지는 범위의 값 중에서 비교적 높은 값의 범위를 나타내었으며 수화 에너지(Hy.E)는 $-146.8\sim 167.0$ Kcal/mol이었다.

AChE 저해제들에 대한 85% 범위의 물리-화학 상수는 대략 다음과 같다. 즉, 소수성(OlogP); $-0.03\sim 4.40$, 쌍극자 능률값(DM); $2.01\sim 10.20$ (debye), MR상수; $50\sim 97$ (cm^3/mol), Pol상수; $18\sim 34$ (\AA^3), HOMO 에너지; $-9.96\sim -7.60$ (eV), LUMO 에너지; $-3.02\sim -0.34$ (eV), 분자 부피(Vol); $572\sim 955$ (cm^3), 분자량; $193\sim 370$ (amu) 그리고 분자 표면적은 $200\sim 340$ (\AA^2) 그리고 수화 에너지는 $-11.7\sim 110.0$ Kcal/mol의 범위를 각각 나타내었다.

의약과의 판별 가능성. 농업용 살균제 분자량($100\sim 582.56$ amu.)의 85% 범위값($210\sim 412$ amu.)과 살충제 분자량($58\sim 994$ amu.)의 85% 범위값($183\sim 477$ amu.)을 가지는 의약품¹⁶⁾을 무작위로 각각 선별하고 10가지의 물리-화학 상수를 계산하였다. 한 예로, 살균제 중 특히, sterol 생합성 저해제들(DMIs)과 하나의 물리-화학 파라미터 당, 설정한 85%의 분포 범위에 포함된 품목수를 백분율(%)로 환산하여 살균제와 의약과의 관계를 Fig. 3에 제시하였다.

제초제의 경우에는 M_R 상수와 Pol.상수가 의약과 매우 상이

하여 제초제와 의약을 구분하는 판별 요소가 될 것으로 예상된 바 있었으나⁴⁾ 의약품은 대체로 logP, Pol. 및 van der Waals 분자 표면적 등이 살균제나 살충제에 비하여 현저히 작은 값을 나타내므로 이들 3가지의 물리-화학 파라미터가 의약과 살균성 화합물을 구분하는 판별 가능한 요소가 될 것으로 예상된다.

이상과 같은 검토 결과에 따라 하나의 화합물이 Table 2~3과 같은 10가지의 물리-화학 상수의 일정한 범위값을 가지는 경우에는 농업용 살균제와 살충제로서의 활성을 나타내게 될 것으로 판단된다. 그러므로 이들 물리-화학 파라미터들의 범위 값들은 알려지지 않았거나 다른 용도로 사용중인 다양한 화합물에 대하여 농업용 살균제와 살충제로서의 용도를 사전에 탐색하고 예측하는데 긴요하게 이용될 수 있을 것이다.

감사의 글

본 연구는 한국과학재단의 우수연구센터(ERC) 지원금(No: R11-2002-100-0302-2)의 일부로 이루어진 것으로 지원에 감사드립니다.

참고문헌

- Hansch, C. and Leo, A. (1995) Pesticide QSAR. Ch. 12, In *Exploring QSAR: Fundamentals and Applications in Chemistry and Biology*, ACS Professional Reference Book, American Chemical Society, Washington, DC.
- Sung, N. D. (2002) Development of new agrochemicals by quantitative structure-activity relationship (QSAR) methodologies. I. The basic concepts and types of QSAR methodologies. *Kor. J. Pesti. Sci.*, **6**, 166-174.
- Sung, N. D. (2002) Development of new agrochemicals by quantitative structure-activity relationship (QSAR) methodologies. II. The linear free energy relationship (LFER) and descriptors. *Kor. J. Pesti. Sci.*, **6**, 231-243.
- Sung, N. D., and Song, S. S. (2003) The range of physicochemical parameters for the active ingredients of herbicides. *Kor. J. Pesti. Sci.*, **7**, 58-65.
- Taylor, P. J. (1990) In *Hydrophobic properties of drug: Comprehensive Medicinal Chemistry* Hansch, C., Sammes, P. G. and Taylor, J. B. (eds.), Pergamon Press, Tronto.
- Tomlin, C. D. S. (2000) *The Pesticide Manual* (12 ed.), The British Crop Protection Council. U.K.
- FRAC (2002), *Publications, FRAC fungicide group names and codes*, Fungicide Resistance Action Committee/www. frac.info.
- IRAC (2002) *Mode of Action Classification*, Insecticide Resistance Action Committee, Plantprotection.org. IRAC.
- ACS (2000) Scifinder Scholar (Ver. 2000), American Chemical Society, Washington, DC, USA.
- Hyperchem (1993) Ver. 6.50., In *Hyperchem for Window. Ch. 7. Chemical Calculations*, Hypercube Inc, Ontario, Canada. pp. 169-216.
- Prous, J. R., Mealy, N. E., Serradell, M. N. and Blancafort, P. (1985) *Annual Drug Data Report*, Vol. VII. Prous Science.
- Leonard G. C. and Hewitt, H. G. (1998) *Chemistry and Mode*

- of Action of Crop Protection Agents*, The Royal Society of Chemistry. UK.
13. Tanaka S., Takahashi, M., Funaki, Y., Izumi, K., Takano, H. and Miyakado, M. (1995) In *Hydrophobicity and Systemic Activities of Fungicidal Triazoles and Blaching Herbicidal Compounds*, Ch. 8, 108-119: *Classical and Three-Dimensional QSAR in Agrochemistry* (ed Hansch, C. and T. Fujita), ACS symposium Series No. 606, American Chemical Society, Washington, DC, USA.
14. Bowden, K. (1990) In *Electron Effects in Drugs; Comprehensive Medicinal Chemistry. The Rational Design, Mechanistic Study & Therapeutic Application of Chemical Compounds*, 229. Pergamon Press, Toronto.
15. Moriguchi, I. Y. and Y. Kanda (1977) Use of van der Waals volume in structure activity studies, *Chem. Pharm. Bull.* **25**, 926-935.

The Range of Physicochemical Parameters for the Active Ingredients of Fungicides and Insecticides as Crop Protection Agents

Nack-Do Sung* and Sun-Sup Song¹ (*Division of Applied Biology & Chemistry, Chung-nam National University, Daejeon 305-764, Korea.*; ¹*Hankook Samgong, Research Institute of pesticide, Seoul, 110-012, Korea*)

Abstract: To develop a diagnosis and estimation system for the utility of fungicides and insecticides as crop protection agents, various 10 physicochemical parameters, hydrophobicity (LogP), dipole moment (DM), HOMO energy, LUMO energy, molar refractivity (MR: cm³/mol), polarizability (Pol: Å³), van der Waals molecular surface area (Å²), van der Waals molecular volume (Vol: cm³), molecular weight (amu), hydration energy (Kcal/mol) for the active ingredients of 133 fungicides and 152 insecticides were calculated. And then the distribution ranges for each of the physicochemical parameters in fungicides, sterol biosynthesis inhibitors (DMI: demethylation inhibitor), insecticides and acetylcholine esterase inhibitors (AChE) were confirmed. It is suggested that the various compounds based on the range of the physicochemical parameters could be predicted for possibilities as fungicides and insecticides.

Key words: crop protection agents, fungicides, insecticides, physicochemical parameters, diagnosis & evaluation system

*Corresponding author