ISNN 3030-3907

2026/4
VOLUME 8

DEVELOPMENT OF SCIENCE

ILMIY JURNAL



Development of science

Ilmiy jurnal

2026/4 VOLUME 8

ISSN 3030 -3907

Ilmiy jurnal OAK rayosatining 2024 yil 27 sentabrdagi 361-son qaroriga asosan 02.00.00 kimyo fanlari hamda 2025 yil 12 fevral 367- son qaroriga asosan 05.00.00 texnika fanlari bo‘yicha falsafa doktori (PhD) va fan doktori (DSc) ilmiy darajasiga talabgorlarning dissertatsiya ishlari yuzasidan dissertatsiyalari asosiy ilmiy natijalarini chop etish tavsiya etilgan milliy ilmiy nashrlar ro‘yxatiga kiritilgan.

BOSH MUHARRIR:
Temirov Alisher Hoshim o‘g‘li – texnika fanlari falsafa doktori (PhD),Dotsent.
TAHRIRIYAT KENGASH RAISI:
Fozilov Sadriddin Fayzullayevich – texnika fanlari doktori, professor
TAHRIRIYAT KENGASH A’ZOLARI

TEXNIKA FANLARI/ TECHNICAL SCIENCES/ ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

Bozorov G‘ayrat Rashidovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor
Abdurahmonov Olim Rustamovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor
Adizov Bobur Zamirovich
O‘zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasi Umumiy va noorganik kimyo instituti, professor
Hayitov Ruslan Rustamjonovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor
Jumayev Qayum Karimovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor.
Berdiyev Dorob Murodovich
Islom Karimov nomidagi Toshkent Davlat Texnika Universiteti, professor
Maxmudov Rafiq Amonovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor.
Tilloyev Lochin Ismatilloyevich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Raxmonov Qahramon Sanakulovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Barakayev Nusratullo Rajabovich
Islom Karimov nomidagi Toshkent Davlat Texnika Universiteti, professor.
Jo‘rayev Xayrullo Fayziyevich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor.
Panoyev Erali Rajabboyevich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Ataullayev Sherzod Nabiullyevich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Murodov Malik Negmurodovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Axmedova Ozoda Bahronovna
Islom Karimov nomidagi Toshkent Davlat Texnika Universiteti.
Safarov Bahri Jumayevich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Xaydarov Axtam Amonovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Safarov Jasur Alijon o‘g‘li
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Асадова Раъно Дилмуратовна
Тошкент Давлат техника университети доценти

KIMYO FANLARI/ CHEMICAL SCIENCES/ ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

Axmedov Voxid Nizomovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor
Umarov Baqo Bafoyevich
Buxoro Davlat Universiteti, professor
Kodirov Abduaxad Abduraximovich
Qarshi davlat Universiteti, professor
Qurbonov Mingniqul Jumagulovich
Qarshi davlat Universiteti, dotsent
Turemuratov Sharibay Naurizbaevich
O‘zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasi Qoraqalpog‘iston bo‘limi Bosh ilmiy kotibi, professor
Tursunov Kaxor Shonazarovich
Qarshi davlat Universiteti, professor
Do‘stov Hamro
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor
Panoyev Nodir Shavkatovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Olimov Bobur Bahodir o‘g‘li
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Kasimov Sherzod Abduazimovich
Termiz Davlat Universiteti, professor.
Aliqulov Rustam Valiyevich
Termiz Davlat Universiteti, professor
Tropov Xamza Tursunovich
Samarqand Davlat Universiteti, professor

IQTISODIYOT FANLARI/ ECONOMICS/ ЭКОНОМИЧЕСКИЕ НАУКИ

Nizamov Aslitdin Badreddinovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor.
Boboyev Akmal Choriyevich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor.
Ergashxojayeva Shaxnoza Djasurovna
Toshkent davlat iqtisodiyot universiteti, professor
Saidaxmedova Nodira Ilxomovna
Toshkent davlat iqtisodiyot universiteti, professor
Muxsinov Bekzod Toxirovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Shakarov Qulmat Ashirovich
Renessans ta'lim universiteti,dotsent.
Jumaeva Zulfiya Qayumovna
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Norova Salomat Yusupovna
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Avezova Shaxnoza Maxmudjonovna
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Jalilov Jamshid G‘anijonovich
Toshkent davlat iqtisodiyot universiteti, dotsent
Xasanova Gulruh Djumanazarovna
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.

PEDAGOGIKA FANLARI/ PEDAGOGICAL SCIENCES / ПЕДАГОГИЧЕСКИЕ НАУКИ

Siddiqova Sadoqat G‘afforovna
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Zoyirov Erkin Xalilovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, DSc, professor
Gaffarov Feruz Hasanovich
Puchon Universiteti, *professor*
Ruziyev Davron Yuldashevich
Buxoro Davlat Universiteti, professor
Muradova Firuza Rashidovna
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor.
Yunusova Gulandon Samiyevna
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor.
To‘xtayeva Zebo Sharifovna
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor.
Navro‘zova Gulchixra Nigmatovna
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Uzoqova Laylo Polvonovna
Buxoro muhandislik – texnologiya instituti, dotsent.
To‘raqulova Marjona Qiyom qizi
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Muradova Zarina Rashidovna
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Murodov Sanjar Aslonovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Shodiyev Jahongir Jo‘raqulovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent
Gaffarov Laziz Hasanovich
Buxoro muhandislik – texnologiya instituti, dotsent.

Tahririyat a’zolarning to‘liq ro‘yxati jurnalning www.devos.uz saytida keltirilgan.

Tahririyat hay’ati a’zolarining tarkibini o‘zgartirish hamda qo‘shimcha kiritish yoki tahririyat a’zoligidan chiqarish bosh muharrir tomonidan amalga oshiriladi.

ISSN 3030-3907

Development of science ilmiy jurnali 2024 yil 15 aprel kuni №256445 sonli guvohnoma bilan Davlat ro‘yxatidan o‘tgan.

To‘plam elektron ko‘rinishda (pdf formatida) mualliflarga taqdim etiladi. To‘plamga kiritiladigan maqolalarning mazmuni, ulardagi statistik ma’lumotlar va me’yoriy hujjatlarning to‘g‘riligiga hamda har qanday fikr - mulohazalarga mualliflarning o‘zlari mas’ul hisoblanadilar. Talablarga javob bermaydigan maqolalar to‘plamga kiritilmaydi. Tashkiliy qo‘mita maqola matnini qisqartirish, qisman tuzatish kiritish, seksiyalarga joylashtirish huquqiga ega.

ISSN 3030-3907

ALLIUM MOTOR O‘SIMLIGI TARKIBIDAGI APIGENIN-7-O-GLIKOZID FLAVONOIDINING *IN SILICO* TADQIQOTI

Pardaqulov A. A.
O‘zbekiston Milliy universiteti, Universitet ko‘chasi 4, 100174, Toshkent
E-mail: abbospardaqulov534@gmail.com
Hayrullayeva Sh.A.
O‘zbekiston Milliy universiteti, Universitet ko‘chasi 4, 100174, Toshkent
Raxmatova G.B.
O‘zbekiston Milliy universiteti, Universitet ko‘chasi 4, 100174, Toshkent
Shokirov M
O‘zbekiston Milliy universiteti, Universitet ko‘chasi 4, 100174, Toshkent
Maxkamov B.G‘.
O‘zbekiston Milliy universiteti, Universitet ko‘chasi 4, 100174, Toshkent

Annotatsiya. Ushbu ishda Allium motor o‘simligi tarkibida aniqlangan Apigenin-7-O-glucoside birikmasining biologik potensiali in silico usuli yordamida baholandi. PASS Online natijalarida, membrana bilan bog‘liq jarayonlarda faol bo‘lish ehtimoli yuqori ekanini ko‘rsatdi. Shu bilan birgalikda o‘tkazilgan molekulyar docking tadqiqotlari ligandning oqsil aktiv markazida barqaror joylashishini va yuqori affinitet bilan bog‘lanishini tasdiqladi; eng qulay holatda bog‘lanish energiyasi G=−9.8 kkal/mol ni tashkil etdi. DFT hisoblashlari HOMO va LUMO orbitallari orasidagi kichik energiya farqi orqali molekulaning reaktivligini asoslab berdi, ESP tahlili esa faol markazlar asosan kislorod atomlari atrofida joylashganini ko‘rsatdi.

Kalit so‘zlar: Apigenin-7-O-glikozid, Allium motor, PASS Online, molekulyar docking, DFT, HOMO–LUMO, elektrostatik potensial.

Аннотация. В данной работе биологический потенциал соединения апигенин-7-О-глюкозида, выявленного в составе растения Allium motor, оценён методом in silico. Результаты PASS Online показали высокую вероятность активности, связанной с мембранными процессами. Проведённые молекулярно-докинговые исследования подтвердили устойчивое размещение лиганда в активном центре белка и его высокую аффинность; в наиболее благоприятной конформации энергия связывания составила G = −9.8 ккал/моль. Квантово-химические расчёты (DFT) выявили малый энергетический разрыв между орбиталями HOMO и LUMO, что указывает на повышенную реакционную способность молекулы, тогда как анализ ESP показал, что основные реакционноспособные центры локализованы преимущественно в области кислородных атомов.

ISSN 3030-3907

Ключевые слова: Апигенин-7-О-глюкозид, Allium motor, PASS Online, молекулярный докинг, DFT, HOMO–LUMO, электростатический потенциал.

Abstract. In this study, the biological potential of apigenin-7-O-glucoside identified in *Allium motor* was evaluated using *in silico* approaches. PASS Online predictions indicated a high probability of activity related to membrane-associated processes. Molecular docking studies confirmed that the ligand stably binds within the protein active site with high affinity; in the most favorable conformation, the binding energy was **G = −9.8 kcal/mol**. Density functional theory (DFT) calculations revealed a small energy gap between the HOMO and LUMO orbitals, indicating notable molecular reactivity, while electrostatic potential (ESP) analysis showed that the main reactive regions are predominantly localized around oxygen atoms.

Keywords: Apigenin-7-O-glucoside, Allium motor, PASS Online, molecular docking, density functional theory (DFT), HOMO–LUMO, electrostatic potential

1.KIRISH.

Allium turkumiga mansub o‘simliklar biologik faol birikmalar manbai sifatida tibbiyot va farmatsevtika amaliyotida muhim o‘rin egallab kelmoqda. Ushbu turkum vakillari tarkibida oltingugurt saqlovchi birikmalar, xususan, flavonoidlar keng tarqalgan bo‘lib, ular yuqori darajadagi antioksidant, yallig‘lanishga qarshi, antimikrob hamda antitumor faolligi bilan tavsiflanadi. So‘nggi yillarda tabiiy flavonoidlarning molekulyar va hujayraviy darajadagi ta’sir mexanizmlarini chuqur o‘rganishga bo‘lgan ilmiy qiziqish sezilarli darajada ortib bormoqda, bu esa ularning samarali farmakologik vositalar sifatida qo‘llanish istiqbollarini yanada asoslashga xizmat qilmoqda[1-3].

Flavonoidlar sinfi vakillari orasida apigenin-7-O-glikozid alohida ilmiy qiziqish uyg‘otadi, u apigeninning glikozid hosilasi sifatida yuqori darajadagi biologik faollikka ega bo‘lgan tabiiy birikma hisoblanadi. Adabiyot ma’lumotlariga ko‘ra, apigenin va uning hosilalari kuchli antioksidant xususiyatga ega bo‘lib, lipid peroksidlanish jarayonlarini ingibirlash, hujayra membranasini barqarorlashtirish sifatida ta’sir ko‘rsatish qobiliyatiga ega [4-6].

An’anaviy eksperimental usullar bilan bir qatorda, hozirgi kunda biologik faol birikmalarni baholashda kompyuter modellash usullari, ya’ni *in silico* yondashuvlar keng qo‘llanilmoqda. Xususan, PASS Online dasturi yordamida moddalarning ehtimoliy biologik faollik baholash, molekulyar docking orqali ligand–retseptor o‘zaro ta’sirlarini baholash hamda zichlik funksional nazariyasi (DFT) asosida molekulaning elektron tuzilishini o‘rganish ilmiy tadqiqotlarda samarali vosita sifatida qaraladi. Ushbu usullar birgalikda qo‘llanilganda

ISSN 3030-3907

moddaning biologik faolligi, ta’sir mexanizmi haqida chuqur va tizimli ma’lumot olish imkonini beradi[7-9].

Allium motor o‘simligidan aniqlangan apigenin-7-O-glikozid flavonoidining biologik potensialini zamonaviy *in silico* usul asosida kompleks baholashdan iborat. Shu maqsadda apigenin-7-O-glikozidning biologik faolligi PASS Online orqali bashorat qilindi va shu bilan birgalikda molekulyar docking tadqiqotlari amalga oshirildi hamda DFT hisoblashlari yordamida uning elektron tuzilishi xususiyatlari tahlil qilindi. Ushbu yondashuv flavonoidlarning farmakologik ahamiyatini chuqurroq anglash hamda yangi biologik faol birikmalarni ilmiy asosda loyihalash uchun muhim nazariy asos yaratadi.

2. MATERIALLAR VA METODLAR. Mazkur tadqiqotda Allium motor o‘simligi ekstrakti tarkibida yuqori samarali suyuqlik xromatografiyasi (YuSSX) yordamida identifikatsiya qilingan apigenin-7-O-glikozid birikmasining biologik xususiyatlari bosqichma-bosqich in silico yondashuv asosida kompleks ravishda o‘rganildi. Tadqiqot konseptual jihatdan uch asosiy bosqichni qamrab oldi: dastlab birikmaning ehtimoliy biologik faolligi prognoz qilindi, keyingi bosqichda ushbu faollikka mos keluvchi molekulyar darajadagi o‘zaro ta’sirlar, xususan, nishon biomakromolekulalar bilan bog‘lanish xususiyatlari tahlil qilindi, yakuniy bosqichda esa molekulaning elektron tuzilishi, kvant-kimyoviy parametrlari hamda reaktivlik ko‘rsatkichlari chuqur nazariy asosda baholandi.

2.1. Tadqiqot obyekti. Tadqiqot uchun asosiy obyekt sifatida *Allium motor* tarkibida aniqlangan apigenin-7-O-glikozid tanlab olindi. Ushbu flavonoid o‘z tuzilishida aromatik halqalar, gidroksil guruhlar hamda glikozid fragmentni tutgani sababli biologik faol birikmalar qatoriga kiradi. Molekulaning uch o‘lchamli modeli dastlab qurildi va keyingi hisoblashlar uchun energetik jihatdan maqbul holatga keltirildi.

2.2. Biologik faollikni PASS Online orqali baholash. Tadqiqotning birinchi bosqichida moddaning ehtimoliy biologik ta’siri PASS Online dasturi yordamida baholandi. Ushbu usul molekulaning tuzilishidan kelib chiqib, uning qaysi biologik faoliyatlarga ega bo‘lishi mumkinligini oldindan ko‘rsatib beradi. Natijalar **Pa** (faol bo‘lish ehtimoli) va **Pi** (faol bo‘lmaslik ehtimoli) ko‘rsatkichlari orqali ifodalanadi. Olingan natijalar ichida Pa qiymati yuqori bo‘lgan faoliyatlar alohida e’tiborga olindi. Xususan, apigenin-7-O-glikozid uchun “membrane permeability inhibitor” faoliyati juda yuqori ehtimollik bilan aniqlangani ushbu yo‘nalishni keyingi tadqiqotlar uchun asos sifatida tanlashga imkon berdi.

2.3. Molekulyar docking tadqiqotlari. PASS natijalariga asoslanib, membrana bilan bog‘liq funksiyaga ega bo‘lgan oqsil target tanlab olindi va uning uch o‘lchamli tuzilmasi 7C4S bazasidan olindi. Molekulyar docking tadqiqotlari

ISSN 3030-3907

CB-Dock2 platformasi yordamida bajarildi. Jarayon davomida oqsil strukturasidan ortiqcha komponentlar (masalan, suv molekulalari) olib tashlandi, zarur vodorod atomlari qo‘shildi va tizim docking uchun tayyorlandi. Ligand sifatida optimallashtirilgan apigenin-7-O-glikozid ishlatildi. Platforma tomonidan avtomatik aniqlangan aktiv markazlarda docking amalga oshirilib, natijalar bog‘lanish energiyasi va o‘zaro ta’sir xarakteriga ko‘ra tahlil qilindi. Ayniqsa, vodorod bog‘lari va gidrofob bog‘lar ligand–retseptor o‘zaro ta’sirining barqarorligini baholashda muhim mezon sifatida qaraldi.

2.4. Kvant-kimyoviy hisoblashlar. Bu ishningg yakuniy bosqichida molekulaning elektron xususiyatlarini aniqlash maqsadida DFT hisoblashlar amalga oshirildi. Hisoblashlar Gaussian 09 dasturida B3LYP funksionali va 6-31G(d,p) bazis to‘plami asosida bajarildi. Dastlab molekulaning geometriyasi to‘liq optimallashtirildi, shundan so‘ng uning elektron tuzilishiga oid asosiy parametrlar aniqlanib tahlil qilindi. Jumladan, HOMO va LUMO orbitallari, ular orasidagi energiya farqi, elektrostatik potensial (ESP) taqsimoti, bog‘ uzunliklari hamda atom zaryadlari hisoblandi. Ushbu parametrlar molekulaning qaysi qismi faol ekanini, elektron beruvchi yoki qabul qiluvchi xususiyatlarini hamda biologik faollik bilan bog‘liq markazlarini aniqlash imkonini berdi.

3. NATIJALAR TAHLILI. Apigenin-7-O-glikozid moddasi ustida olib borilgan PASS Online, molekulyar docking va DFT hisoblashlari natijalari izchil ravishda ko‘rib chiqildi. Olingan ma’lumotlar nafaqat alohida tahlil qilinadi, balki ular o‘zaro bog‘liqlikda yoritilib, moddaning biologik xususiyatlari va ehtimoliy ta’sir mexanizmlari bilan izohlanadi. PASS Online tahlilida Apigenin-7-O-glikozid moddasi uchun PASS Online natijalari uning yuqori darajadagi biologik faollikka ega ekanini ko‘rsatdi. Deyarli barcha aniqlangan faoliyatlar uchun Pa qiymatlari 0.90 dan yuqori, Pi esa juda past bo‘lib, bu natijalarning ishonchliligini tasdiqlaydi (1-jadval)

1-jadval

P_a	Pi	Activity
0,983	0,001	Membrane integrity agonist
0,980	0,001	Monophenol monooxygenase inhibitor
0,976	0,001	Hemostatic
0,974	**0,001**	**Membrane permeability inhibitor**
0,971	0,001	Cardioprotectant
0,969	0,001	Vasoprotector

ISSN 3030-3907

0,954	0,002	Anaphylatoxin receptor antagonist
0,949	0,001	Free radical scavenger

Eng e'tiborga molik jihati shundaki — moddaning membrana bilan bog'liq faoliyati. Xususan, membrane integrity agonist (Pa = 0.983) va membrane permeability inhibitor (Pa = 0.974) natijalari uning hujayra membranasini barqarorlashtirishi va modda almashinuvini tartibga solishi mumkinligini ko'rsatadi.Bundan tashqari, monophenol monooxygenase inhibitor, free radical scavenger va lipid peroxidase inhibitor kabi natijalar moddaning kuchli antioksidant xususiyatga ega ekanini bildiradi. Shuningdek, cardioprotectant, vasoprotector va anticarcinogenic faoliyatlar aniqlanishi apigenin-7-O-glikozidning yurak-qon tomir va saraton bilan bog'liq jarayonlarda ham istiqbolli ekanini ko'rsatadi.Umuman olganda, PASS natijalari ushbu flavonoidning ko'p yo'nalishli biologik potensialga ega ekanini ko'rsatib, ayniqsa membrana bilan bog'liq mexanizmlarni chuqurroq o'rganish zarurligini asoslaydi.

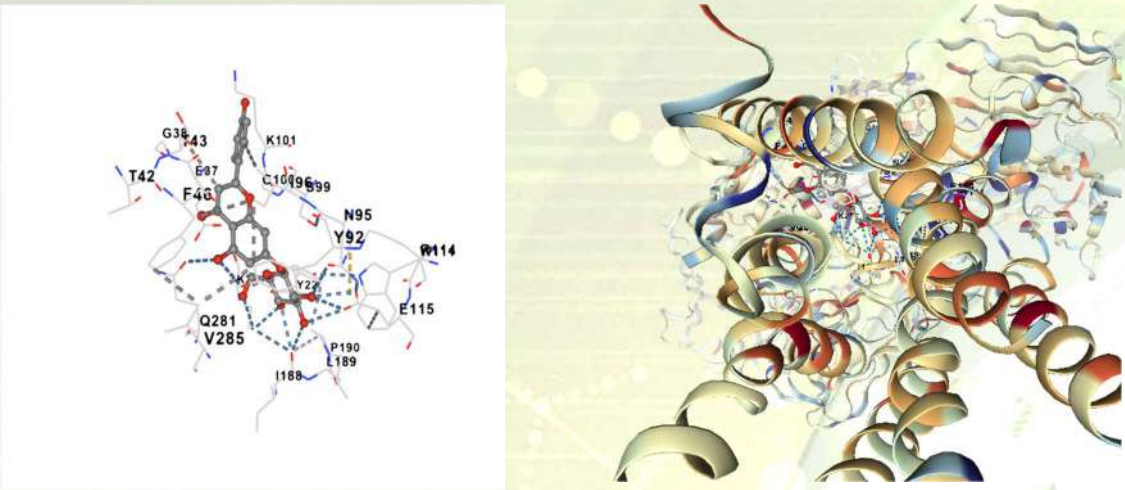
Molekulyar docking natijalari tahlili Apigenin-7-O-glucoside moddasining molekulyar docking natijalari tanlangan target oqsil bilan barqaror bog'lanish hosil qilish qobiliyatiga ega ekanini ko'rsatdi. Eng yaxshi natija C1 pozitsiya uchun kuzatilib, bog'lanish energiyasi −9.8 kcal/mol ni tashkil etdi. Bu qiymat ligand–retseptor o'zaro ta'sirining yuqori affinitetga ega ekanini bildiradi (2-jadval).

2-jadval

Apigenin-7-O-glikozidning molekulyar docking natijalari: turli pozitsiyalarda bog'lanish energiyasi va koordinatalari

C1	-9.8	3716	3, 50, 21	24, 35, 34
C4	-8.9	2341	-10, -26, 28	24, 24, 24
C2	-8.5	3569	35, 17, 30	24, 35, 24
C5	-8.3	2279	10, 33, 28	24, 24, 24
C3	-8.1	2510	8, -1, 27	35, 24, 24

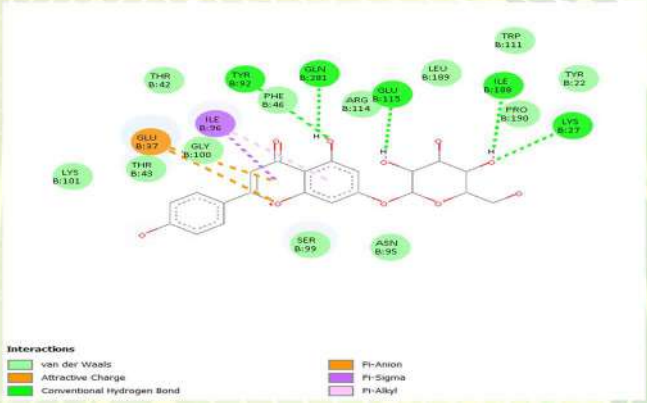
ISSN 3030-3907



2-rasm. Apigenin-7-O-glikozidning molekulyar docking natijalari: ligandning aktiv markazda joylashuvi 3D ko‘rinishi

Shuningdek, boshqa pozitsiyalar (C4, C2, C5 va C3) uchun ham energiya qiymatlari (ΔG =−8.1 dan −8.9) kcal/mol oralig‘ida bo‘lib, bu ham molekulaning oqsil aktiv markaziga yaxshi moslashishini ko‘rsatadi. Ayniqsa, C2 va C4 konfiguratsiyalarda kuzatilgan natijalar dockingning barqarorligini tasdiqlaydi.

Olingan natijalar apigenin-7-O-glikozid molekulasining tanlangan oqsil bilan kuchli va barqaror bog‘lanishini ko‘rsatadi. Eng past energiya qiymatining (ΔG =−9.8 kcal/mol) aniqlanishi moddaning biologik faol targetlarga nisbatan yuqori affinitetga ega ekanini bildiradi. (2-ram) Ushbu natijalar PASS Online orqali aniqlangan biologik faollik bilan mos kelib, molekulaning amaliy jihatdan istiqbolli bioaktiv birikma ekanini tasdiqlaydi.



3-rasm. Ligand–retseptor o‘zaro ta’sirining 2D ko‘rinishi

Apigenin-7-O-glucoside molekulasining docking natijalari asosida olingan 2D interaction diagrammasi uning oqsil aktiv markazida qanday joylashganini va qaysi aminokislotalar bilan o‘zaro ta’sirga kirishayotganini aniq ko‘rsatadi (3-rasm).

Tahlil natijalariga ko‘ra, ligand bir nechta muhim vodorod bog‘lari hosil qilgan. Xususan, GLN (B:281), GLU (B:115), ILE (B:188) va LYS (B:27) qoldiqlari bilan hosil bo‘lgan vodorod bog‘lari kompleksning barqarorligini

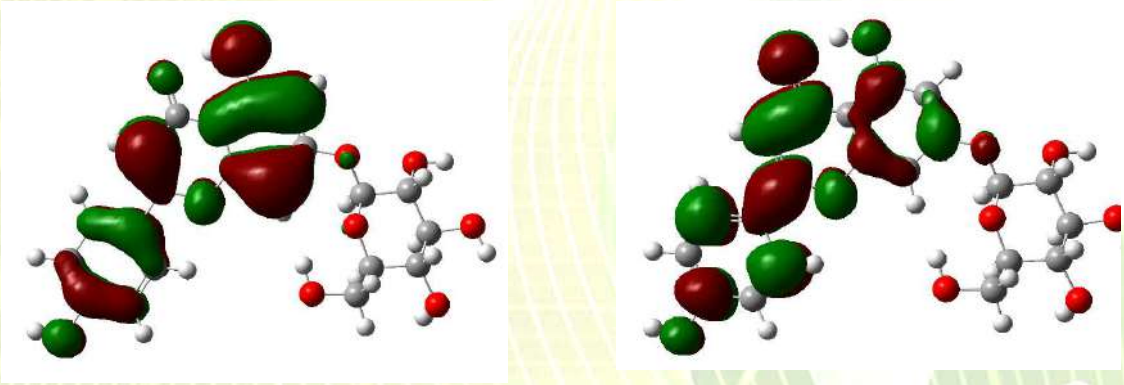
ISSN 3030-3907

ta’minlovchi asosiy omillardan hisoblanadi. Ushbu bog‘lar ligandning aktiv markazda mustahkam ushlanib turishiga yordam beradi.

Shuningdek, ko‘plab aminokislotalar (THR, PHE, ARG, LEU, PRO, TYR va boshqalar) bilan van der Waals o‘zaro ta’sirlari aniqlangan bo‘lib, ular kompleksni qo‘shimcha ravishda barqarorlashtiradi.

Tahlil natijalari apigenin-7-O-glikozid molekulasi oqsil aktiv markazida ko‘p turdagi o‘zaro ta’sirlar orqali mustahkam joylashishini ko‘rsatadi. Ayniqsa, vodorod bog‘lari va π-o‘zaro ta’sirlarning mavjudligi uning yuqori bog‘lanish affinitetini tushuntiradi. Bu natijalar dockingda olingan past energiya qiymatlari bilan mos kelib, moddaning biologik faol targetlarga nisbatan yuqori samaradorlikka ega ekanini tasdiqlaydi.

HOMO–LUMO orbitallari va elektron tuzilish tahlili. Apigenin-7-O-glucoside molekulasining elektron xususiyatlari DFT hisoblashlar asosida baholandi. HOMO va LUMO orbitallarining taqsimoti molekulaning qayerda “faolroq” ekanini aniq ko‘rsatib beradi (4-rasm).



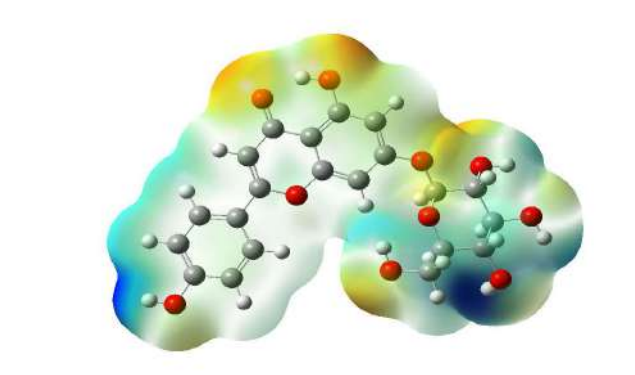
HOMO LUMO

4-rasm. Apigenin-7-O-glucoside molekulasining HOMO va LUMO orbitallarining 3 D ko‘rinishi

HOMO orbitalida elektron zichlik asosan aromatik halqa va kislorod atomlari atrofida jamlangan. Bu joylar molekulaning elektron berishga moyil qismlari bo‘lib, aynan shu hududlar orqali u boshqa molekulalar bilan o‘zaro ta’sirga kirishadi. Bu holat flavonoidlarga xos bo‘lib, ularning antioksidant xususiyatini tushuntiradi. LUMO orbitalida esa aksincha, elektron qabul qiluvchi hududlar ko‘rinadi. Elektron zichlik kislorodga boy fragmentlarda va ayrim kon’yugatsiyalangan qismlarda joylashgan bo‘lib, bu molekulaning tashqi elektronlarni qabul qilish qobiliyatiga ega ekanini bildiradi. Hisoblash natijalariga ko‘ra HOMO va LUMO energiyalari mos ravishda **−0.22589 a.u.** va **−0.07596 a.u.** ni tashkil etdi. Ular orasidagi farq (ΔE) **0.14993 a.u.** bo‘lib, bu nisbatan kichik qiymat hisoblanadi. Bu esa molekulaning reaktivligi yuqori ekanini va elektron almashinuvi jarayonlarida oson ishtirok etishini ko‘rsatadi.

ISSN 3030-3907

Umuman olganda, HOMO va LUMO natijalari apigenin-7-O-glikozidning elektron donor va akseptor xususiyatlari yaxshi rivojlanganini ko‘rsatadi. Bu esa uning PASS tahlilida aniqlangan biologik faolliklari, ayniqsa antioksidant va membrana bilan bog‘liq ta’sirlari bilan mos keladi.



5-rasm. Apigenin-7-O-glikozid molekulasining elektrostatik potensial (ESP) xaritasi

Elektrostatik potensial tahlili. Apigenin-7-O-glucoside molekulasining elektrostatik potensial (ESP) xaritasi undagi zaryadlarning fazoviy taqsimotini aniq ko‘rsatadi va qaysi hududlar reaksiyaga kirishishga moyil ekanini tushunishga yordam beradi(5-rasm).

ESP tahliliga ko‘ra, apigenin-7-O-glikozid molekulasida manfiy potensial hududlar asosan kislorod atomlari atrofida to‘planib, elektronlarga boy nukleofil markazlar sifatida namoyon bo‘ladi. Musbat potensial zonalar esa vodorod atomlari yaqinida joylashib, elektrofil xususiyat kasb etadi. Neytral hududlar molekulaning nisbatan barqaror qismlarini ifodalaydi. Umuman olganda, zaryadlarning notekis taqsimlanishi molekulaning polar tabiatga ega ekanini ko‘rsatadi. ESP natijalari HOMO–LUMO tahlili bilan mos ravishda, reaktiv markazlarning asosan kislorod atomlari bilan bog‘liqligini hamda molekulaning donor–akseptor xususiyatlari uning biologik faolligida muhim rol o‘ynashini tasdiqlaydi.

XULOSA.

Mazkur tadqiqot natijalari Allium motor o‘simligidan ajratib olingan apigenin-7-O-glikozid birikmasining yuqori biologik potensialga ega ekanini in silico yondashuvlar asosida kompleks tarzda tasdiqladi. PASS Online prognozlari ushbu flavonoidning ayniqsa hujayra membranasi bilan bog‘liq jarayonlarni modulyatsiya qilishda, xususan membrana barqarorligini ta’minlash va o‘tkazuvchanlikni tartibga solishda muhim rol o‘ynashi mumkinligini ko‘rsatdi. Molekulyar docking natijalari ligand–retseptor o‘zaro ta’sirlarining yuqori affinitet va barqarorlik bilan kechishini, ya’ni past bog‘lanish energiyasi hamda ko‘p sonli vodorod bog‘lari va π-o‘zaro ta’sirlar mavjudligini aniqlab, prognoz qilingan

ISSN 3030-3907

biologik faollikni molekulyar darajada asoslab berdi. DFT hisoblashlari orqali molekulaning elektron tuzilishi, xususan HOMO–LUMO orbitallari orasidagi kichik energiya tafovuti uning yuqori reaktivligi va rivojlangan donor–akseptor xususiyatlarini namoyon etdi, ESP tahlili esa asosiy reaktiv markazlarning kislorod atomlari bilan bog‘liqligini ko‘rsatdi. Umuman olganda, olingan natijalar bir-birini to‘ldirib, apigenin-7-O-glikozidni ko‘p yo‘nalishli biologik faollikka ega, ayniqsa membrana bilan bog‘liq jarayonlarni samarali modulyatsiya qiluvchi istiqbolli tabiiy birikma sifatida tavsiflaydi. Ushbu xulosalar flavonoidlar asosida yangi farmakologik vositalarni ishlab chiqishda muhim nazariy asos bo‘lib xizmat qilishi hamda keyingi eksperimental tadqiqotlar bilan tasdiqlanishi zarurligini ko‘rsatadi.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR

1. Griffiths, G., Trueman, L., Crowther, T., Thomas, B., & Smith, B. (2002). Onions—a global benefit to health. Phytotherapy Research: An International Journal Devoted to Pharmacological and Toxicological Evaluation of Natural Product Derivatives, 16(7), 603-615.
2. Lanzotti, V. (2006). The analysis of onion and garlic. Journal of chromatography A, 1112(1-2), 3-22.
3. Bhat, R. (2020). Bioactive compounds of Allium species. In Bioactive Compounds in Underutilized Vegetables and Legumes (pp. 1-20). Cham: Springer International Publishing.
4. Salehi, B., Venditti, A., Sharifi-Rad, M., Kręgiel, D., Sharifi-Rad, J., Durazzo, A., ... & Martins, N. (2019). The therapeutic potential of apigenin. International journal of molecular sciences, 20(6), 1305.
5. Kashyap, P., Shikha, D., Thakur, M., & Aneja, A. (2022). Functionality of apigenin as a potent antioxidant with emphasis on bioavailability, metabolism, action mechanism and in vitro and in vivo studies: A review. Journal of food biochemistry, 46(4), e13950.
6. Imran, M., Aslam Gondal, T., Atif, M., Shahbaz, M., Batool Qaisarani, T., Hanif Mughal, M., ... & Sharifi-Rad, J. (2020). Apigenin as an anticancer agent. Phytotherapy Research, 34(8), 1812-1828.
7. Lagunin, A., Stepanchikova, A., Filimonov, D., & Poroikov, V. (2000). PASS: prediction of activity spectra for biologically active substances. Bioinformatics, 16(8), 747-748.
8. Blanchard, P., & Brüning, E. (2015). Density functional theory of atoms and molecules. In Mathematical methods in physics: distributions, Hilbert space operators, variational methods, and applications in quantum physics (pp. 563-573). Cham: Springer International Publishing.

ISSN 3030-3907

9. Rather, M. A., Rasool, S., Khursheed, A., Ahmed, S. S., Bashir, F., Shalla, A. H., ... & Dangroo, N. A. (2025). Decoding the Therapeutic Potential of Apigenin as a Nonpeptide PD-1/PD-L1 Immune Checkpoint Inhibitor in Breast Cancer: An Integrated, Multimethod Study Using Network Pharmacology, Bioinformatics, Molecular Docking, and Dynamics Simulations. Journal of Chemistry, 2025(1), 5133015.

ISSN 3030-3907