ISNN 3030-3907

2026
JUNE
ISSUE - 6
VOLUME -1

DEVELOPMENT OF SCIENCE

scientific journal



Development of science

Ilmiy jurnal

IYUN 2026
Issue - 6, VOLUME – 1

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.

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

BA'ZI POLIFENOLLAR VA ULARNING AYRIM HOSILALARINI KOMPYUTER DASTURLARI YORDAMIDA BIOLOGIK FAOLLIKLARINI O'RGANISH

Axmedov Abbos Ravshan o'g'li
Guliston davlat universiteti, 120100. Sirdaryo viloyati, Guliston shahri, 4-mikrorayon. Guliston Davlat Universiteti ,tayanch doktoranti PhD.
Abduraxmanova Ugilay Koxxorovna
Guliston davlat universiteti, 120100. Sirdaryo viloyati, Guliston shahri, 4-mikrorayon. Guliston Davlat Universiteti , proffessor
E-mail: abbosbekahmedov123@gmail.com

Annotatsiya. Bugungi kunda flavonoid birikmalar o'zining turli birikmalar va kompleks turlari bilan jadal rivojlanmoqda, ayni shu turdagi o'simlik flovonlaridan rutin va kversetin moddasi birikmalari ham rivojlanib bormoqda .Ushbu tadqiqotda polifenol birikmalari bo'lgan rutin va kversetin molekulalarining biologik ahamiyatga ega maqsadli oqsillar bilan o'zaro ta'sirini baholash maqsadida kompyuter-modellashtirishga asoslangan auto-docking tahlili amalga oshirildi. Ligandlar sifatida rutin va kversetin makromolekula sifatida esa tanlangan oqsilning kristall tuzilmasi (PDB) qo'llanildi. Docking jarayonining dastlabki bosqichida oqsil strukturasidan suv molekulalari va keraksiz ligandlar olib tashlandi, protonlash darajasi moslashtirildi. Rutin va kversetin molekulalari geometriyasi optimallashtirildi,. Hisoblashlar AutoDock Vina dasturida bajarilib, eng quyi bog'lanish energiyasiga ega modellarning orientatsiyalari (pose) tahlil qilindi. Natijalar rutin va kversetin molekulalarining aktiv markaz aminokislotalari bilan kuchli vodorod bog'lari, π–π ta'sirlar va gidrofob kuchlar orqali barqaror komplekslar hosil qilishini ko'rsatdi. Tadqiqot natijalari Rutin va Kversetin birikmalarining biologik faolligini prognoz qilish, shuningdek yangi bioaktiv moddalarning dizaynida muhim nazariy asos bo'lib xizmat qiladi.

Kalit so'zlar: Rutin, kversetin, efir moylari, flavanoid, biologik faollik, , alfa-pinen, 6SHI, 9BJ5 va 9QE7 oqsillarining 8RSS, AutoDock, oqsil.

Аннотация. Сегодня флавоноидные соединения стремительно развиваются, предлагая разнообразные соединения и комплексные типы, а также разрабатываются соединения того же типа растительных флавонов, рутина и кверцетина. В данном исследовании был проведен анализ автодокинга, основанный на компьютерном моделировании, для оценки взаимодействия полифенольных соединений, рутина и кверцетина, с биологически важными целевыми белками. Рутин и кверцетин использовались в качестве лигандов, а кристаллическая структура (PDB) выбранного белка – в качестве макромолекул. На начальном этапе процесса

ISSN 3030-3907

докинга из структуры белка удалялись молекулы воды и ненужные лиганды, а также корректировался уровень протонирования. Геометрия молекул рутина и кверцетина была оптимизирована. Расчеты проводились в программе AutoDock Vina, и анализировались ориентации (позы) моделей с наименьшей энергией связи. Результаты показали, что молекулы рутина и кверцетина образуют стабильные комплексы с аминокислотами активного центра посредством прочных водородных связей, π–π-взаимодействий и гидрофобных сил. Результаты исследования служат важной теоретической основой для прогнозирования биологической активности соединений рутина и кверцетина, а также для разработки новых биоактивных веществ.

Ключевые слова: Рутин Кверцетин, эфирные масла, флавоноид, биологическая активность, альфа-пинен, 8RSS 6SHI, белки 9BJ5 и 9QE7, AutoDock, белок.

Abstract. Today, flavonoid compounds are rapidly developing with their various compounds and complex types, and compounds of rutin and quercetin from the same type of plant flavones are also being developed. In this study, an auto-docking analysis based on computer modeling was performed to evaluate the interaction of polyphenol compounds rutin and quercetin molecules with biologically important target proteins. Rutin and quercetin were used as ligands, and the crystal structure (PDB) of the selected protein was used as macromolecules. At the initial stage of the docking process, water molecules and unnecessary ligands were removed from the protein structure, the protonation level was adjusted. The geometry of rutin and quercetin molecules was optimized. The calculations were performed in the AutoDock Vina program, and the orientations (poses) of the models with the lowest binding energy were analyzed. The results showed that rutin and quercetin molecules form stable complexes with the active center amino acids through strong hydrogen bonds, π–π interactions, and hydrophobic forces. The results of the study serve as an important theoretical basis for predicting the biological activity of Rutin and Quercetin compounds, as well as for the design of new bioactive substances.

Keywords: rutin quercetin, essential oils, flavonoid, biological activity, , alpha-pinene, 8RSS of 6SHI, 9BJ5 and 9QE7 proteins, AutoDock, protein.

KIRISH.

Polifenollar — bu o‘simliklarda tabiiy ravishda uchraydigan organik birikmalar bo‘lib, ularning asosiy vazifasi o‘simliklarni zararli tashqi ta’sirlardan, jumladan ultrabinafsha nurlanishdan, hasharotlar va bakteriyalardan himoya qilishdir. Bu birikmalar ayniqsa mevalar, sabzavotlar, yong‘oqlar, choy, qahva, kakao va sharobda ko‘p miqdorda mavjud bo‘ladi. Polifenollar kimyoviy tarkibi va tuzilishiga ko‘ra turli xil guruhlarga bo‘linadi: flavonoidlar, fenol kislotasi,

ISSN 3030-3907

stilbenlar va lignanlar. Ularning har biri inson salomatligiga ijobiy ta’sir ko‘rsatuvchi xususiyatlarga ega bo‘lib, antioksidant, yallig‘lanishga qarshi, antikarsinogen, antimikrob va yurak-qon tomir tizimiga foydali ta’sirlari bilan mashhurdir. Shu bilan birgalikda polifenollar tanadagi erkin radikallarni neytrallash orqali hujayralarni oksidlovchi stressdan himoya qiladi. Erkin radikallar hujayralarning DNKsiga zarar yetkazishi mumkin bo‘lib, bu o‘z navbatida qarish jarayonini tezlashtiradi va turli surunkali kasalliklarga olib keladi. Polifenollar shu kabi jarayonlarning oldini oladi yoki kechiktiradi. Bundan tashqari, ularning yurak-qon tomir tizimiga bo‘lgan foydasi ko‘plab tadqiqotlarda isbotlangan. Masalan, flavonoidlar qon bosimini pasaytirishga, qon tomirlar elastikligini saqlashga va xolesterin darajasini normallashtirishga yordam beradi. Ular tromb hosil bo‘lishining oldini oladi, bu esa yurak xurujlari va insult xavfini kamaytiradi. Polifenollar shuningdek, ichak mikroflorasini yaxshilashda ham muhim rol o‘ynaydi. Ular foydali bakteriyalar o‘sishini rag‘batlantirib, zararli bakteriyalarni bostiradi. Bu esa nafaqat ovqat hazm qilish tizimi faoliyatini yaxshilaydi, balki immunitetni ham mustahkamlaydi. Ichak florasining barqarorligi ko‘plab boshqa kasalliklarning, jumladan ruhiy holat buzilishlarining ham oldini oladi.

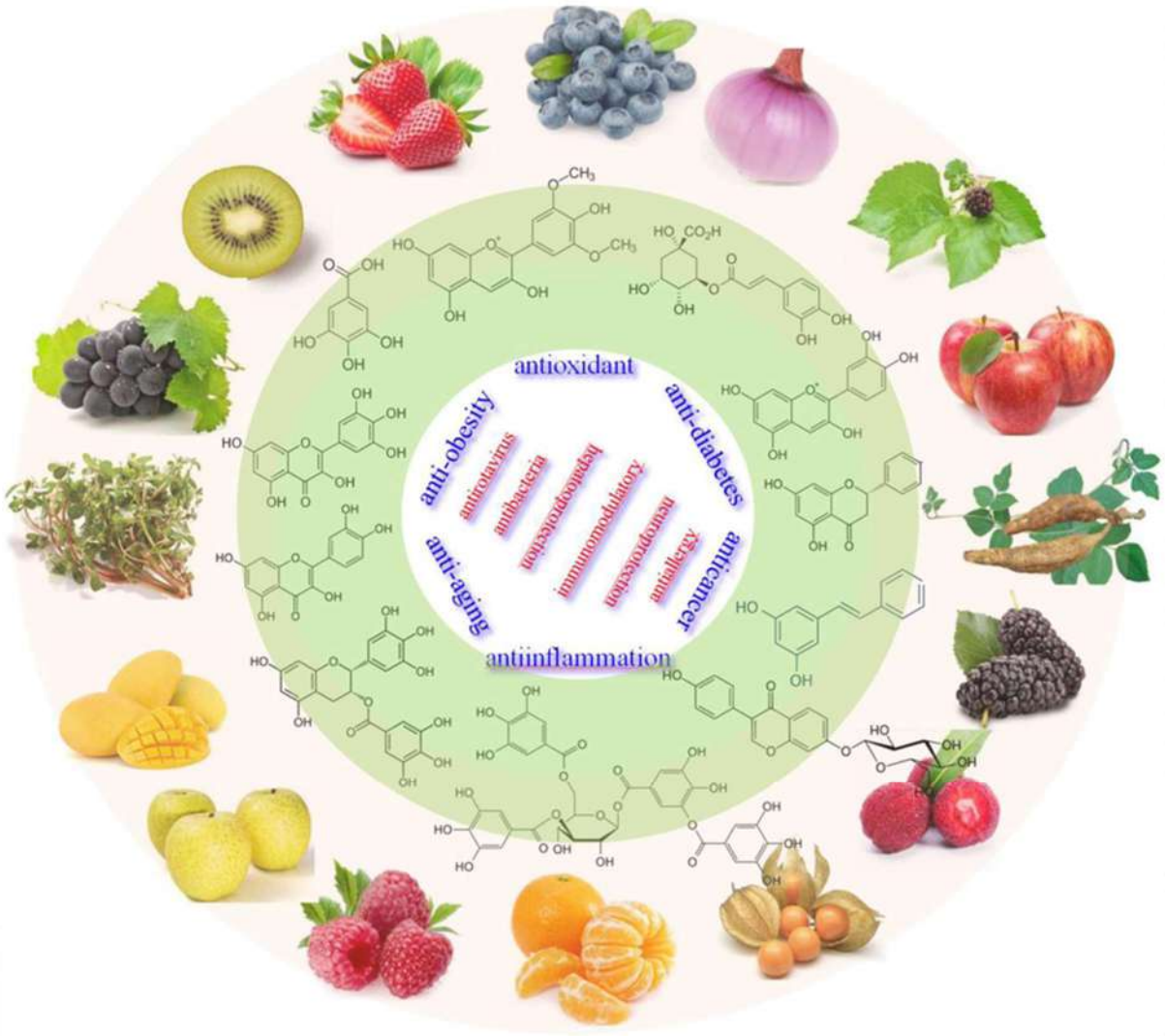
Polifenollar saraton kasalliklariga qarshi potensial himoya omili sifatida ham o‘rganilgan. Ularning antioksidant xususiyatlari DNK mutatsiyalarining oldini olishda muhim ahamiyat kasb etadi. Ayrim polifenollar yallig‘lanishni kamaytirish, hujayra o‘sishini tartibga solish va saraton hujayralarining ko‘payishini sekinlashtirish kabi mexanizmlar orqali antikarsinogen ta’sir ko‘rsatadi. Masalan, yashil choyda mavjud bo‘lgan epigallokatexin gallat (EGCG) moddasi ko‘plab tajribalarda o‘sma hujayralarini o‘ldiruvchi xususiyatga ega ekanligi aniqlangan. Shuningdek, qizil uzum po‘stlog‘ida topiladigan resveratrol moddasi ko‘krak, prostata va yo‘g‘on ichak saratonining oldini olishda yordam berishi mumkinligi ko‘rsatilgan. Biroq, bu boradagi ko‘pchilik tadqiqotlar hali laboratoriya yoki hayvonlar tajribasi darajasida bo‘lib, inson organizmida ham xuddi shunday ta’sir bo‘lishi to‘liq isbotlanmagan.

Polifenollar markaziy nerv tizimi salomatligida ham muhim rol o‘ynaydi. Ular neyroprotektor xususiyatga ega bo‘lib, nerv hujayralarining degeneratsiyasiga qarshi kurashadi. Bu, ayniqsa, Altsgeymer, Parkinson va boshqa nevrodegenerativ kasalliklarning oldini olishda muhim hisoblanadi. Tadqiqotlar shuni ko‘rsatmoqdaki, flavonoidlar miya qon aylanishini yaxshilaydi, yallig‘lanishni kamaytiradi va neyrotransmitterlar faolligini tartibga soladi. Bu esa xotira, o‘rganish qobiliyati va umumiy kognitiv salohiyatni saqlashga xizmat qiladi. Ayniqsa, kakaoda uchraydigan flavanol moddalar miya faoliyatini

ISSN 3030-3907

rag‘batlantiruvchi xususiyatlari bilan ajralib turadi. Shu sababli qorong‘u shokoladni me’yorida iste’mol qilish foydali sanaladi.

Polifenollar manbalari. (1-rasm) Polifenollarni oziq-ovqat orqali qabul qilish nisbatan oson. Yashil choy, qora choy, qahva, qizil va binafsha mevalar, sitrus mevalar, zaytun moyi, qizil uzum, qora shokolad, pomidor, piyoz, brokkoli, yong‘oqlar, to‘liq don mahsulotlari kabi oziq-ovqatlar eng boy manbalar hisoblanadi. Har xil rangdagi sabzavot va mevalarni iste’mol qilish orqali polifenollarning keng doirasini tanovul qilish mumkin. Termik ishlov natijasida ba’zi polifenollar parchalanishi mumkin, shu sababli meva va sabzavotlarni xom holatda yoki engil bug‘da pishirib yeyish tavsiya etiladi. Fermentatsiyalangan mahsulotlar, masalan, tempeh yoki kefir kabi probiotik oziq-ovqatlar ham polifenollar va ularning so‘rilishiga ijobiy ta’sir ko‘rsatadi.

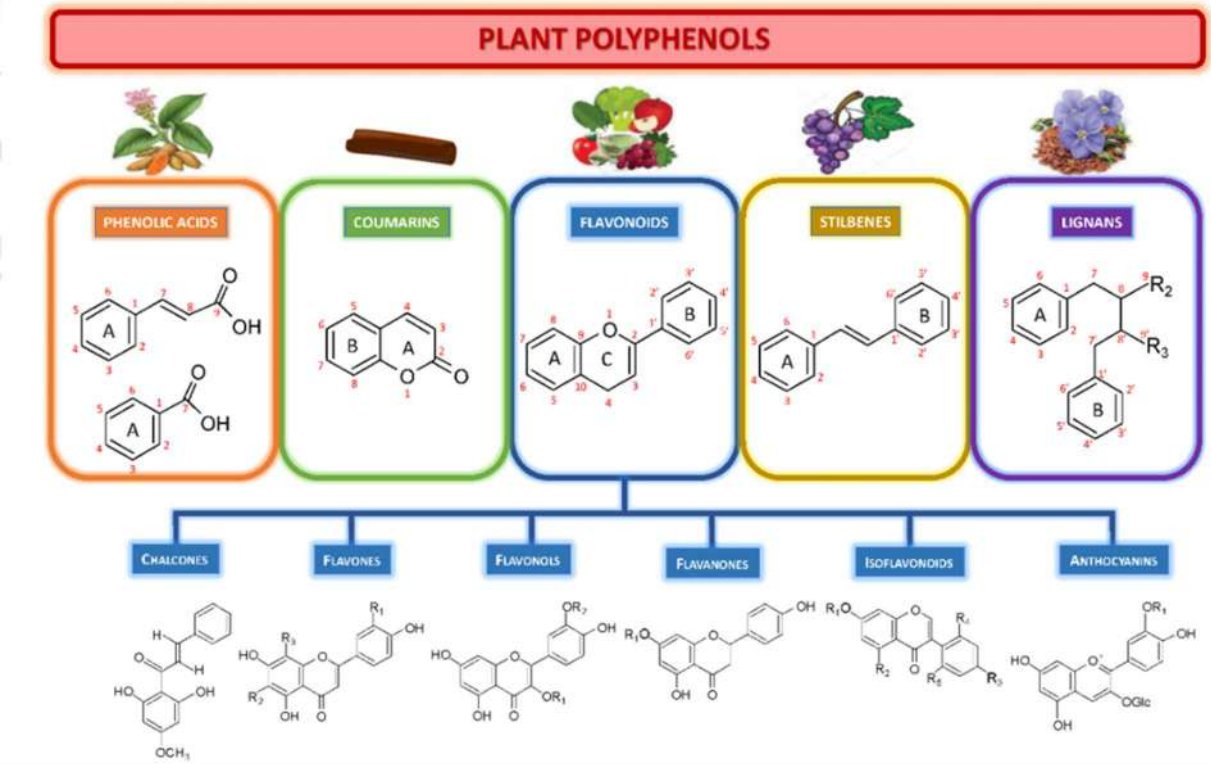


1-rasm Polifenollar manbalari.

Flavonoidlar va ularning turlari. Flavonoidlar polifenollar guruhining eng keng tarqalgan bo‘limi hisoblanadi. Ular asosan meva va sabzavotlarda, ayniqsa sitrus mevalar, uzum, olma, piyoz, yashil choy va kakao tarkibida ko‘p uchraydi. Flavonoidlar bir necha kichik guruhlarga bo‘linadi: flavonlar, flavonollar, flavan-

ISSN 3030-3907

3-ollar, flavanonlar, antosiyaninlar va izoflavonlar. Antosiyaninlar mevalarga qizil, binafsha yoki ko‘k rang beruvchi pigmentlar bo‘lib, ularning antioksidant xususiyati ayniqsa kuchli hisoblanadi. Izoflavonlar esa ko‘proq dukkakli ekinlarda uchraydi va fitoestrogen xususiyatiga ega bo‘lib, ayollarda menopauza davrida yuzaga keladigan gormonal o‘zgarishlarni muvozanatlashga yordam beradi.



2-rasm O‘simlik polifenollari (Flavonoidlar) va ularning turlari.

Polifenollarning so‘rilishi va biologik faolligi. Polifenollar iste’mol qilinganidan so‘ng darhol so‘rilmaydi. Ularning ko‘pchilik qismi yo‘g‘on ichakgacha yetib boradi, u yerda ichak mikroflorasi tomonidan parchalanadi va biologik faol metabolitlarga aylanadi. Shu sababli, ichak mikrobiotasining sifati va tarkibi polifenollarning tana uchun foydali ta’sirlarini belgilaydi. Ba’zi odamlar polifenollardan ko‘proq foyda ko‘radi, bu ularning ichak florasi qanchalik xilma-xil va sog‘lom ekanligiga bog‘liq. Biologik faollik, ya’ni organizmda ta’sir ko‘rsatish qobiliyati, polifenolning turi, kimyoviy tuzilishi va qaysi oziq-ovqat bilan birga iste’mol qilinganiga ham bog‘liq. Masalan, ba’zi yog‘lar bilan birga qabul qilinganda ularning so‘rilishi yaxshilanadi.

Umuman olganda, polifenollar tabiiy oziq-ovqatlar tarkibida uchraganida xavfsiz hisoblanadi. Biroq, ularni biologik qo‘shimchalar shaklida haddan tashqari ko‘p iste’mol qilish mumkin emas. Yuqori konsentratsiyadagi flavonoidlar yoki boshqa polifenol ekstraktlari ba’zida jigar faoliyatiga salbiy ta’sir ko‘rsatishi yoki dorilar bilan o‘zaro ta’sirga kirishishi mumkin. Masalan, ba’zi flavonoidlar ba’zi dorilarning so‘rilishini kamaytirishi yoki aksincha,

ISSN 3030-3907

ularning organizmdagi ta’sirini kuchaytirib yuborishi mumkin. Shu sababli, doimiy dori iste’mol qilayotganlar yoki surunkali kasalliklari bor insonlar polifenol qo‘shimchalarini qabul qilishdan oldin shifokor bilan maslahatlashishlari lozim. Ammo tabiiy oziq-ovqatlar orqali polifenollarni olish sog‘liq uchun faqat foydali bo‘lib, ularning zararli ta’siri deyarli kuzatilmaydi.

Polifenollar — bu o‘simliklar olamining inson sog‘lig‘i uchun tuhfa qilgan bebaho boyliklaridan biridir. Ular organizmni oksidlovchi stressdan himoya qilish, yurak-qon tomir, asab va ovqat hazm qilish tizimlarini qo‘llab-quvvatlash, yallig‘lanishga qarshi kurashish, hatto saratonning oldini olish kabi keng ko‘lamli foydali ta’sirlar ko‘rsatadi. Ularni ratsionga kiritish uchun murakkab parhez talab etilmaydi — shunchaki har kuni rang-barang sabzavotlar, mevalar, choy va yong‘oqlarni iste’mol qilish orqali polifenollarning tanadagi darajasini oshirish mumkin. Sog‘lom ovqatlanish orqali tanamizni mustahkamlashda polifenollar eng muhim tabiiy vositalardan biri sifatida e’tirof etilishi kerak.

TADQIQOT METODOLOGIYASI. Molekulyar docking zamonaviy biokimyoviy tadqiqotlarda ligand va oqsil o‘rtasidagi o‘zaro ta’sirlarni aniqlashda muhim hisoblanadi. Ushbu yondashuv yangi biofaol moddalarning potentsial inhibitori yoki aktivator sifatida baholanishiga imkon beradi. Kallikreinlar, RNK-bog‘lovchi oqsillar va hujayra yopishuv oqsillari (adhesinlar) kabi biomolekulalar ko‘plab fiziologik va patologik jarayonlarda ishtirok etadi. Shu sababli ularning tabiiy yoki sintetik moddalarga nisbatan affinitetini aniqlash muhim ahamiyatga ega.

Tadqiqotlarda 6SHI, 9BJ5 va 9QE7 oqsillarining faol markazlari bilan Kversetin, Kversetin-3,7,3',4'-tetrametilefiri va rutin o‘rtasidagi bog‘lanish energiyalari AutoDock Tools yordamida hisoblab chiqildi. Natijalar oqsillar strukturasiga ko‘ra farqlanuvchi affinitetlarni tahlil qilish imkonini berdi.

Oqsil tuzilmalari tadqiqotda quyidagi oqsillar PDB ma’lumotlar bazasidan yuklab olindi:

1-Jadval

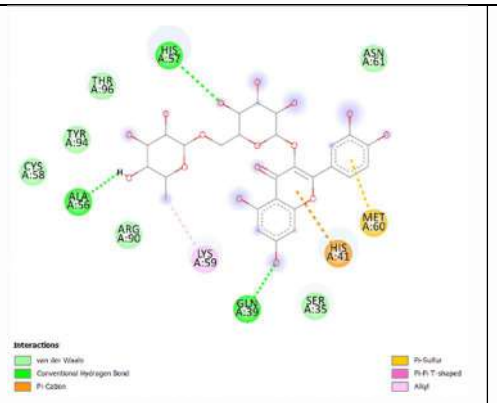
PDB ID	Oqsil nomi	Organizm	Tavsif
6SHI	*Human kallikrein 7*	*Homo sapiens*	Serin proteaza, gidrolaza oilasi
9BJ5	*AbiV (HEPN family protein)*	*Lactococcus cremoris*	RNK-bog‘lovchi oqsil

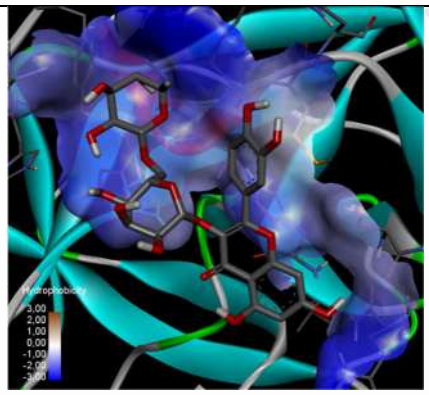
ISSN 3030-3907

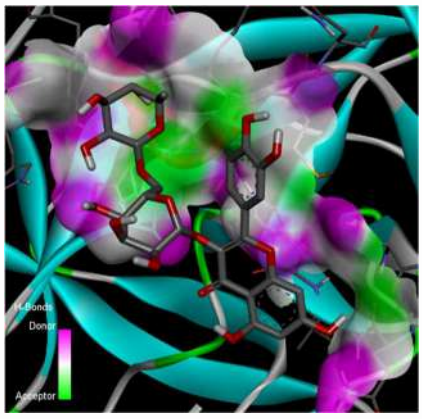
PDB ID	Oqsil nomi	Organizm	Tavsif
9QE7	*Fap2 autotransporter adhesin*	*Fusobacterium nucleatum*	Hujayra yopishuv oqsili

Ligandlar. Tadqiqotlarda uchta ligand o‘rganildi: Kversetin, Kversetin-3,7,3’,4’-tetramethylether va rutin ($C_{27}H_{30}O_{16}$). Ligandlar energetik jihatdan optimallashtirilib, AutoDock Tools dasturida PDBQT formatiga o‘tkazildi. *Docking natijalari.* Docking AutoDock Tools (AutoDock Vina interfeysi) yordamida o‘tkazildi. Har bir oqsil uchun faol markaz atrofida qidiruv panjarasi (grid box) markazlashtirilib, quyidagi parametrlar o‘rnatildi: Har bir ligand uchun 10 ta ehtimoliy konformatsiya (pose) baholandi va eng past energiya qiymati tahlil uchun tanlandi.

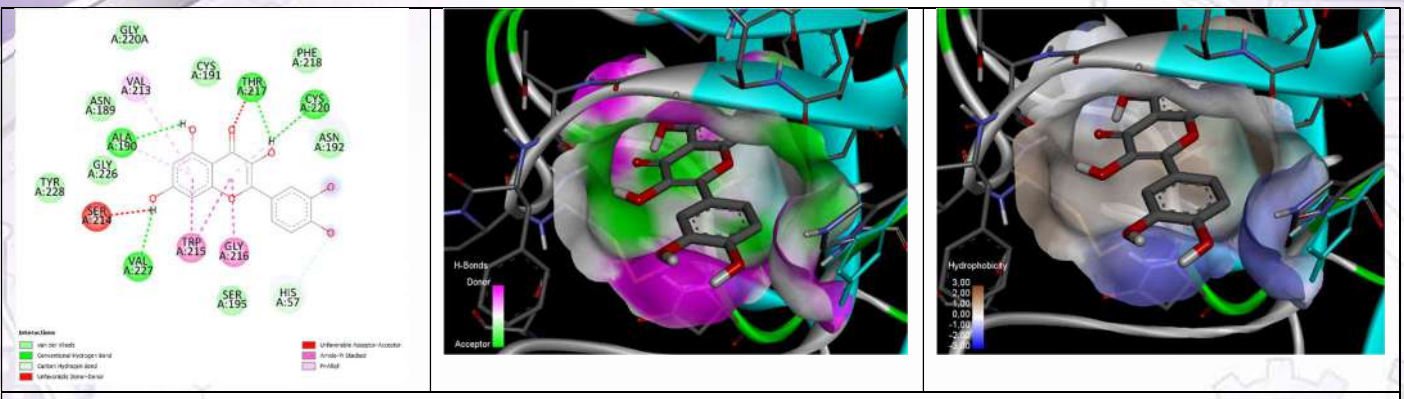
NATIJALAR MUHOKAMASI.



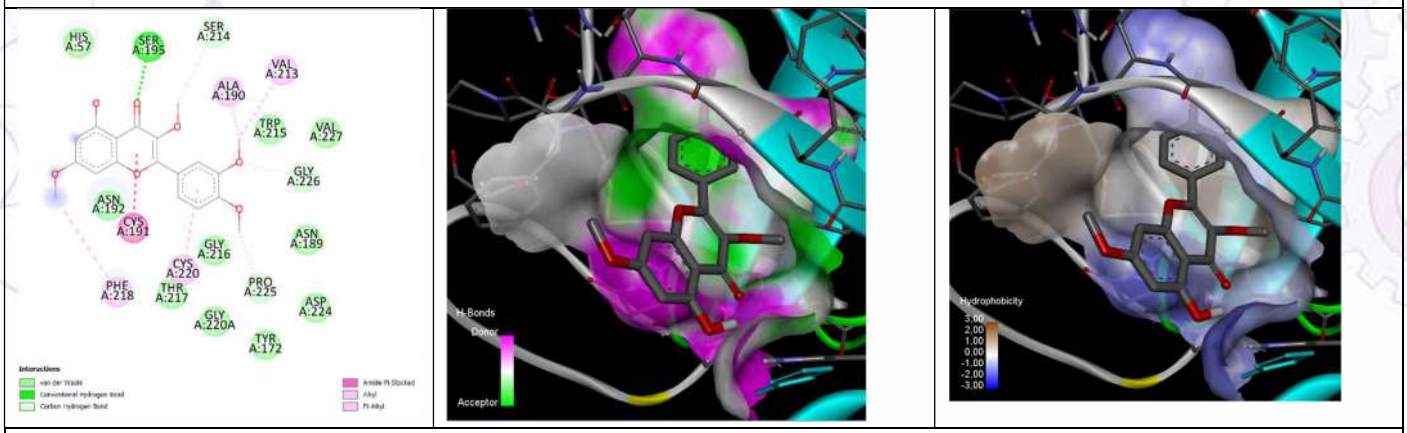




Rutin

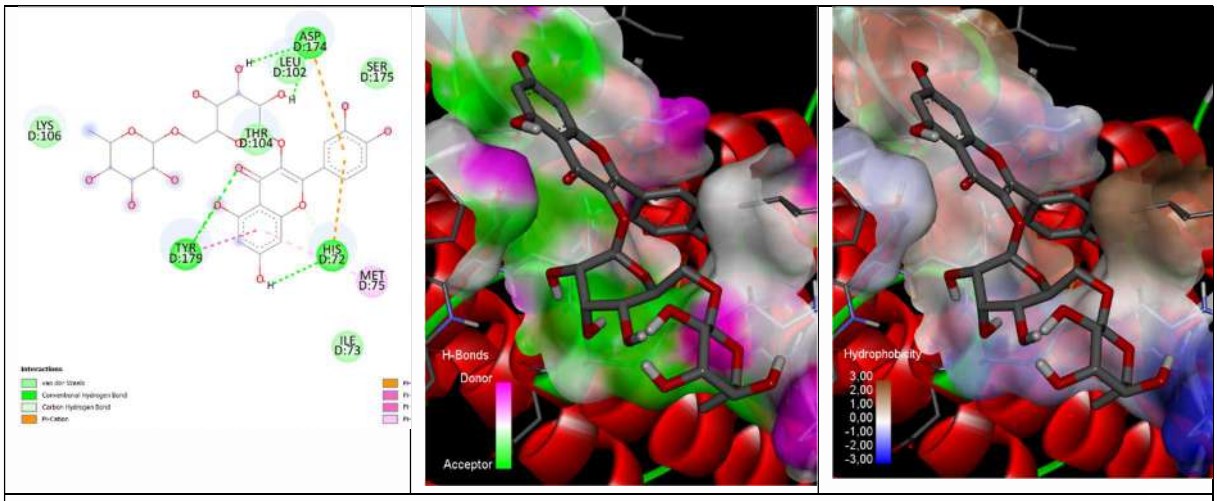


Kversetin

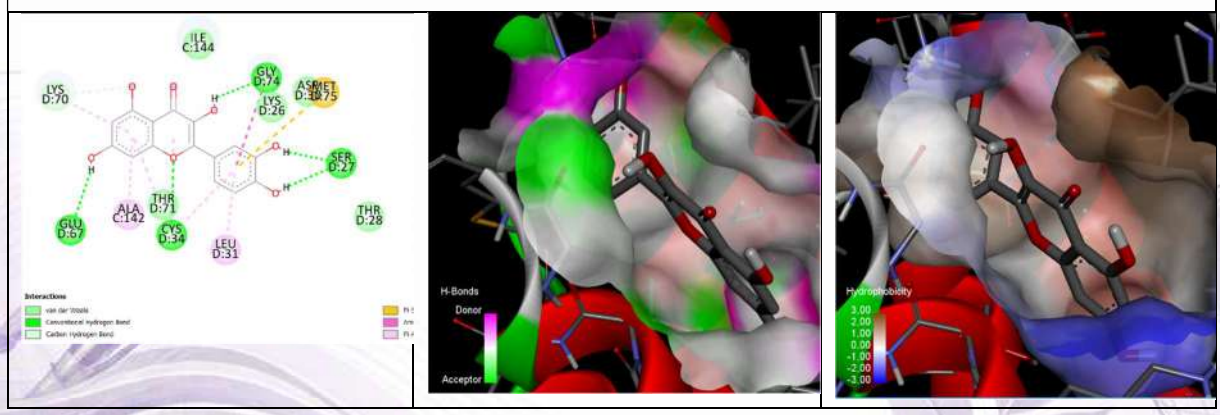


Kversetin-3,7,3',4'-tetrametilefiri

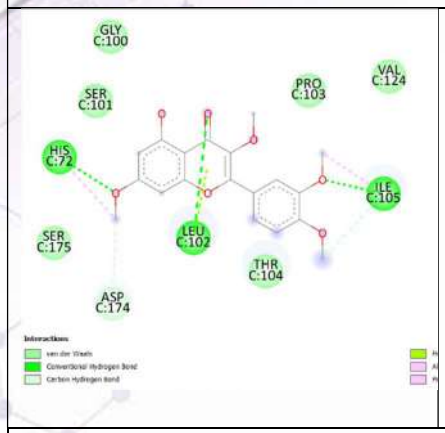
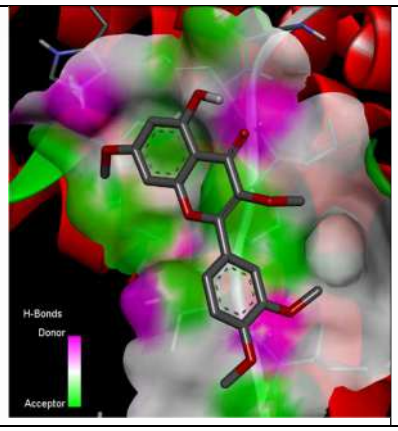
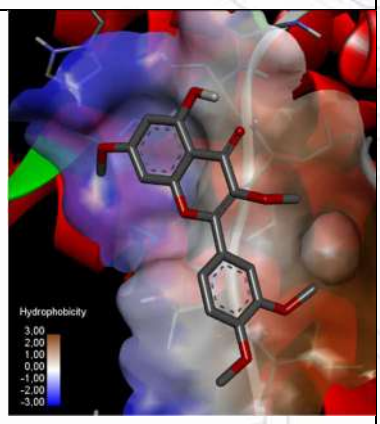
3-rasm. 6SHI OQSILI ning Doking tahlili



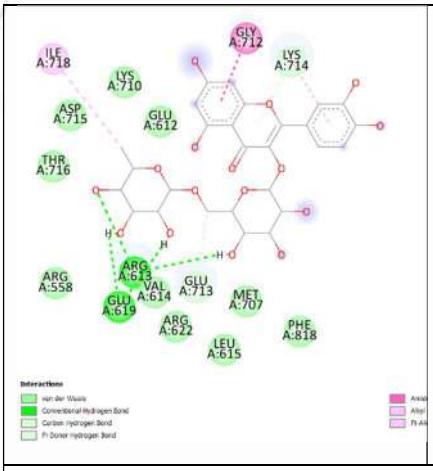
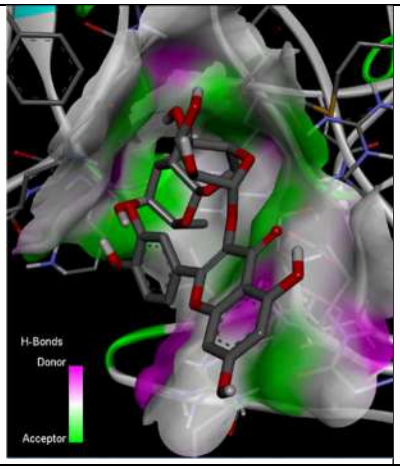
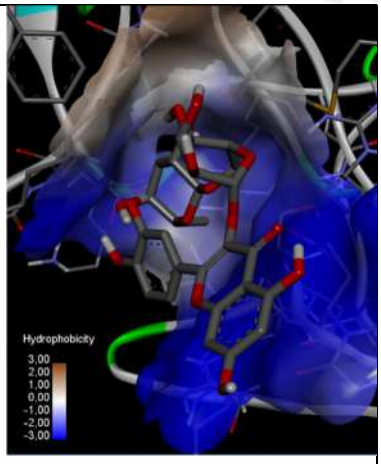
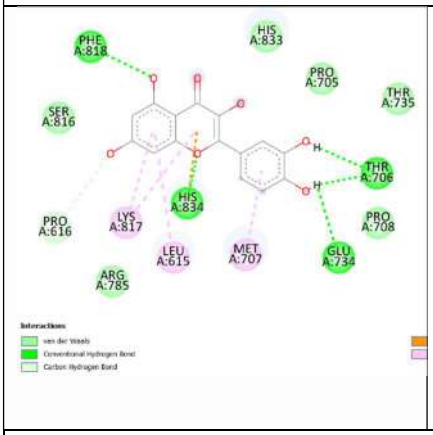
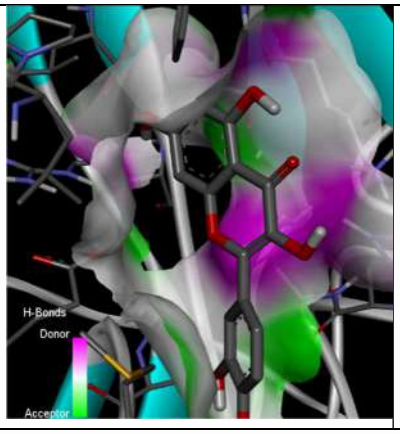
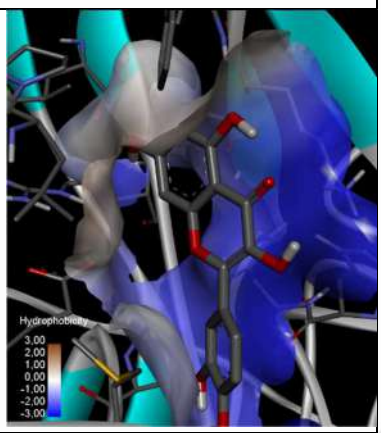
Rutin

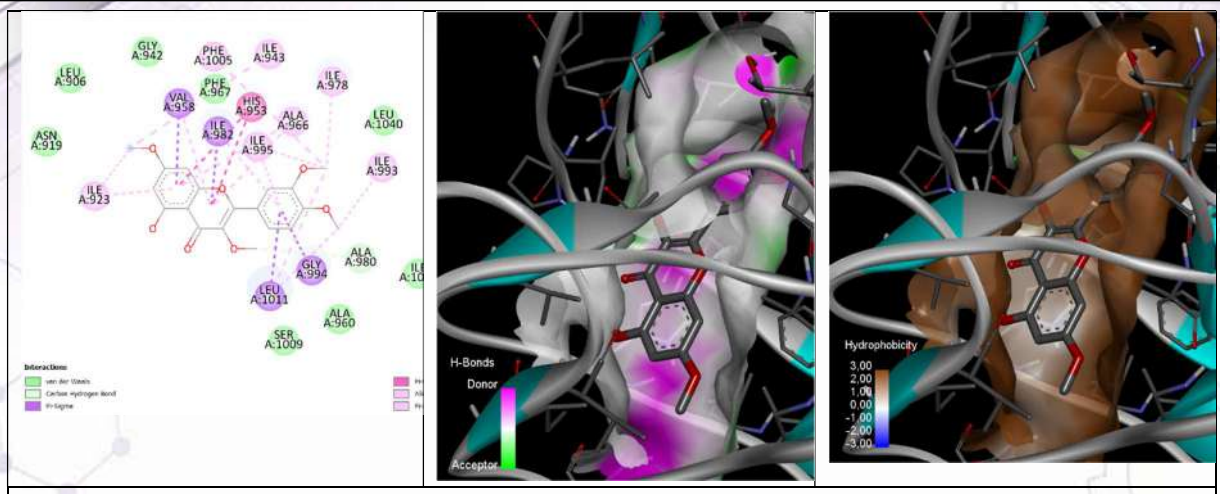


ISSN 3030-3907

Kversetin		
		
Kversetin-3,7,3',4'-tetrametilefiri		

4-rasm. 9BJ5 OQSILI DOKING tahlili

		
Rutin		
		
Kversetin		



Kversetin-3,7,3',4'-tetrametilefiri

5-rasm. 9QE7 OQSILI DOKING tahlili

Oqsil–ligand komplekslarining bog‘lanish energiyalari **1-jadval**da keltirilgan.

2-jadval.

Docking natijalari (AutoDock Tools)

№	Oqsil (PDB ID)	Ligand	Bog‘lanish energiyasi (kcal/mol)
1	6SHI – *Human kallikrein 7*	Kversetin	**–6.65**
		Kversetin-3,7,3’,4’-tetramethylether	–6.40
		Rutin	–5.02
2	9BJ5 – *AbiV (HEPN protein)*	Kversetin	**–6.25**
		Kversetin-3,7,3’,4’-tetramethylether	–4.37
		Rutin	–3.57
3	9QE7 – *Fap2 adhesin*	Kversetin	–4.32
		Kversetin-3,7,3’,4’-tetramethylether	**–5.19**
		Rutin	–2.72

ISSN 3030-3907

Docking natijalari shuni ko‘rsatdiki, 6SHI va 9BJ5 oqsillarida **Kversetin** eng quyi bog‘lanish energiyasini ko‘rsatgan, bu esa uning yuqori affinitetga ega ekanini bildiradi. Aksincha, 9QE7 oqsilida **Kversetin-3,7,3’,4’-tetramethylether** eng barqaror kompleksni hosil qilgan (–5.19 kcal/mol). Rutin esa barcha hollarda nisbatan yuqori (kam manfiy) energiyaga ega bo‘lib, oqsillarga nisbatan zaifroq bog‘lanishni namoyish etdi.

6SHI oqsili (kallikrein-7) serin proteazlar oilasiga mansub bo‘lib, gidrolitik faol markazida *His57–Asp102–Ser195* triadasi mavjud. Kversetinning bu markaz atrofida joylashishi va past energiya ko‘rsatishi uning potentsial ingibitor sifatida qiziqarli ekanini bildiradi.

9BJ5 oqsili RNK-bog‘lovchi domenlarga ega bo‘lgani uchun elektrostatik ta’sirlar muhim rol o‘ynaydi; Kversetinning bu oqsilga nisbatan yuqori bog‘lanishi uning qutbli funksional guruhlari orqali bog‘lanishini taxmin qiladi. 9QE7 oqsili esa bakterial yopishuvda ishtirok etuvchi tashqi membrana oqsili bo‘lib, Kversetin-3,7,3’,4’-tetramethyletherning bu oqsilga nisbatan eng quyi energiya ko‘rsatishi gidrofob o‘zaro ta’sirlarning ustunligini ko‘rsatadi.

XULOSA. AutoDock Tools dasturida o‘tkazilgan molekulyar docking tahlilida eng past energiya qiymati –6.65 kcal/mol (6SHI–Kversetin) kompleksi uchun qayd etildi.

Kversetin ikkita oqsil (6SHI va 9BJ5) bilan yuqori affinitet namoyon etdi, bu uning potentsial inhibitor sifatida ahamiyatga ega ekanini ko‘rsatadi.

Kversetin-3,7,3’,4’-tetramethylether 9QE7 oqsili bilan eng barqaror kompleks hosil qilgan, bu uning bakterial yopishuv jarayonlariga ta’sir etuvchi modda sifatida tadqiq etilishiga imkon beradi.

Rutin har uchala oqsilga nisbatan past affinitet ko‘rsatgan va ehtimol tabiiy flavonoid sifatida passiv ligand vazifasini bajaradi.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR

1. Panche, AN, Diwan, AD va Chandra, SR (2016). Flavonoidlar: tavsif. Sog‘lom fanlar kundaligi, 5, e47.

2. Rodriguez-Mateos, A., Vauzour, D., Krueger, CG, Shanmuganayagam, D., Reed, J., Calani, L., ... va Crozier, A. (2014). Bioavailability, bioaktivlik va parhez flavonoidlari va tegishli birikmalarning kuchiga ta'siri: yangilanish. Toksikologiya hujjatlari, 88(10), 1803-1853.

3. Del Rio, D., Rodriges-Mateos, A., Spenser, JP, Tognolini, M., Borxes, G. va Crozier, A. (2013). Inson farovonligidagi parhez (poli) fenollar: dizaynlar, bioavailability vadavom etayotgan kasalliklarga qarshi himoya ta'sirini isbotlash. Antioksidantlar va redoks belgilari, 18(14), 1818-1892.

4. Panche, AN, Diwan, AD va Chandra, SR (2016). Flavonoidlar: tavsif. Sog‘liqni saqlash fanlari kundaligi, 5, e47.

ISSN 3030-3907

5. Vang, S., Moustaid-Moussa, N., Chen, L., Mo, H., Shastri, A., Su, R. va Shen, CL (2014). Parhezli polifenollar va to‘liqlik bilan bog‘liq yangi tajribalar. Sog‘lom organik kimyo kundaligi, 25(1), 1-18.
6. Vauzour, D., Rodriguez-Mateos, A., Crown, G., Oruna-Concha, MJ va Spenser, JP (2010). Polifenollar va inson farovonligi: kasalliklarga qarshi kurash va faoliyat komponentlari. Qo‘shimchalar, 2(11), 1106-1131.
7. Panahi, Y., Hosseini, MS, Khalili, N., Naimi, E., Majeed, M., and Sahebkar, A. (2015). Metabolik holati bo‘lgan sub’ektlarda curcuminoid-piperin aralashmasining hujayralarni mustahkamlash va tinchlantiruvchi ta'siri: randomize nazorat ostida dastlabki va yangilangan meta-tekshiruv. Klinik ta'minot, 34(6), 1101-1108.
8. Uilyamson, G. va Klifford, MN (2017). Polifenollarning metabolik taqdirini hal qilishda kichik ovqat hazm qilish tizimi, yo‘g‘on ichak va mikrobiotaning vazifasi.Biokimyoviy farmakologiya, 139, 24-39.

ISSN 3030-3907