RELATIONSHIP BETWEEN THE CHEMICAL STRUCTURE OF ORGANIC COMPOUNDS AND THEIR BIOLOGICAL ACTIVITY: A STRUCTURE–ACTIVITY RELATIONSHIP PERSPECTIVE

Boqayeva Mahliyo Ahdovna
Samarqand davlat universiteti, Samarqand, O‘zbekiston.
Anvarov Toxirjon O‘tkir o‘g‘li
Samarqand davlat tibbiyot universiteti, Samarqand, O‘zbekiston.

Annotatsiya. Organik birikmalarning kimyoviy tuzilishi va biologik faolligi o‘rtasidagi bog‘liqlik zamonaviy organik, bioorganik va farmatsevtik kimyoning muhim tadqiqot yo‘nalishlaridan biridir. Molekulaning funksional guruhlari, fazoviy konfiguratsiyasi, elektron zichligining taqsimlanishi, lipofilligi, sterik xususiyatlari va vodorod bog‘lari hosil qilish qobiliyati uning biologik nishonlar bilan o‘zaro ta’siriga ta’sir ko‘rsatadi. Ushbu maqolaning maqsadi organik birikmalarning tuzilish-faollik bog‘liqligini (structure–activity relationship, SAR) zamonaviy kimyoviy va molekulyar yondashuvlar asosida tahlil qilishdan iborat. Maqolada funksional guruhlarning biologik faollikka ta’siri, stereokimyoviy xususiyatlarning ahamiyati, fizik-kimyoviy parametrlar va miqdoriy tuzilish-faollik bog‘liqligi (quantitative structure–activity relationship, QSAR) modellarining qo‘llanilishi yoritiladi. Shuningdek, kompyuter kimyosi, molekulyar doking va mashinaviy o‘qitish usullarining biologik faollikni bashorat qilishdagi imkoniyatlari ko‘rib chiqiladi. Tahlil natijalari kimyoviy tuzilish va biologik ta’sir o‘rtasidagi bog‘liqlik ko‘p omilli xususiyatga ega ekanligini hamda alohida strukturaviy o‘zgarishlarning ta’siri birikma sinfi va biologik nishonga qarab farqlanishini ko‘rsatadi. Ushbu yondashuv yangi biologik faol birikmalarni izlash, istiqbolli molekulalarni optimallashtirish va ularning farmakologik xususiyatlarini dastlabki baholash uchun nazariy asos yaratadi.

Kalit so‘zlar: organik birikmalar, biologik faollik, tuzilish-faollik bog‘liqligi, QSAR, molekulyar dizayn, funksional guruhlar.

Аннотация. Взаимосвязь химического строения органических соединений и их биологической активности является одним из важных направлений современной органической, биоорганической и фармацевтической химии. Функциональные группы молекулы, её пространственная конфигурация, распределение электронной плотности, липофильность, стерические характеристики и способность образовывать водородные связи влияют на взаимодействие соединения с биологическими мишенями. Цель настоящей статьи — проанализировать взаимосвязь «структура–активность» (structure–activity relationship, SAR) на основе современных химических и молекулярных подходов. Рассматриваются влияние функциональных

ISSN 3030-3907

групп на биологическую активность, значение стереохимических характеристик, роль физико-химических параметров и применение моделей количественной зависимости «структура–активность» (quantitative structure–activity relationship, QSAR). Особое внимание уделяется возможностям вычислительной химии, молекулярного докинга и машинного обучения в прогнозировании биологической активности. Проведённый анализ позволяет рассматривать связь между химическим строением и биологическим действием как многофакторный процесс, в котором влияние отдельных структурных изменений зависит от класса соединений и особенностей биологической мишени. Рассматриваемые подходы создают теоретическую основу для поиска новых биологически активных соединений, оптимизации перспективных молекул и предварительной оценки их фармакологических свойств.

Ключевые слова: органические соединения, биологическая активность, взаимосвязь «структура–активность», QSAR, молекулярный дизайн, функциональные группы.

Abstract. The relationship between the chemical structure of organic compounds and their biological activity represents an important research area in modern organic, bioorganic, and pharmaceutical chemistry. Functional groups, stereochemical configuration, electron-density distribution, lipophilicity, steric properties, and hydrogen-bonding capacity influence the interactions of molecules with biological targets. This review aims to examine structure–activity relationships (SAR) using contemporary chemical and molecular approaches. The discussion covers the influence of functional groups on biological activity, the significance of stereochemical features, the role of physicochemical descriptors, and the application of quantitative structure–activity relationship (QSAR) models. Particular attention is given to computational chemistry, molecular docking, and machine learning approaches for predicting biological activity. The reviewed evidence indicates that the relationship between chemical structure and biological response is multifactorial and that the effects of individual structural modifications depend on the chemical scaffold, the biological target, and the experimental context. Integrating experimental evidence with computational analysis may support the identification of biologically active compounds, the optimization of promising molecular structures, and the preliminary assessment of pharmacological properties. However, computational predictions require appropriate validation using reliable experimental data. This review provides a conceptual framework for understanding how molecular features contribute to biological activity and how

ISSN 3030-3907

structure-based approaches can inform the rational development of bioactive organic compounds.

Keywords: organic compounds, biological activity, structure–activity relationship, QSAR, molecular design, functional groups.

KIRISH.

Organik birikmalar zamonaviy kimyo, biologiya, tibbiyot va farmatsevtika fanlarining fundamental tadqiqot obyektlaridan hisoblanadi. Ularning biologik faolligi molekulyar tuzilish, elektron xususiyatlar, stereokimyo va fizik-kimyoviy parametrlarning o‘zaro ta’siri bilan belgilanadi.

Tuzilish-faollik bog‘liqligi (SAR) kimyoviy birikmaning molekulyar tuzilishi va biologik ta’siri o‘rtasidagi munosabatni o‘rganuvchi yondashuvdir. Miqdoriy tuzilish-faollik bog‘liqligi (QSAR) esa molekulyar tavsiflovchilar yordamida biologik faollikni matematik modellar orqali baholash imkonini beradi. Ushbu usullar yangi biologik faol molekulalarni izlash va mavjud birikmalarning xususiyatlarini optimallashtirishda muhim ahamiyatga ega. NCBI

Molekulyar tuzilishdagi kichik o‘zgarishlar ham birikmaning biologik nishon bilan bog‘lanish kuchi, selektivligi, eruvchanligi, membranalardan o‘tishi va metabolik barqarorligiga ta’sir qilishi mumkin. Biroq bunday o‘zgarishlarning natijasi barcha birikmalar uchun bir xil bo‘lmaydi. Masalan, ma’lum bir funksional guruhning kiritilishi ayrim molekulalarda faollikni oshirsa, boshqa molekulalarda sterik to‘siqlar yoki noqulay elektron ta’sirlar tufayli faollikni kamaytirishi mumkin.

Tabiiy birikmalar va ularning hosilalarini o‘rganishga bag‘ishlangan zamonaviy sharhlarda sintetik modifikatsiya, fermentativ yondashuvlar, kompyuter yordamida molekulyar dizayn va sun’iy intellekt usullarini birgalikda qo‘llashning istiqbollari ta’kidlangan. PubMed

TADQIQOTNING MAQSADI.

Organik birikmalarning asosiy strukturaviy xususiyatlari bilan biologik faolligi o‘rtasidagi bog‘liqlikni ilmiy adabiyotlar asosida tahlil qilish va SAR/QSAR yondashuvlarining imkoniyatlarini baholashdan iborat.

Tadqiqot vazifalari:

1. Funksional guruhlarning biologik faollikka ta’sirini tavsiflash.
2. Molekulalarning stereokimyoviy xususiyatlari va biologik nishonlar bilan o‘zaro ta’sirini ko‘rib chiqish.
3. Lipofillik, qutblilik va vodorod bog‘lari kabi fizik-kimyoviy parametrlarning rolini baholash.
4. SAR va QSAR usullarining ilmiy-amaliy imkoniyatlarini tahlil qilish.

ISSN 3030-3907

5. Hisoblash kimyosi va mashinaviy o‘qitishning biologik faollikni bashorat qilishdagi o‘rnini aniqlash.

MATERIALLAR VA USULLAR.

Ushbu maqola ilmiy sharh shaklida rejalashtirilgan. Shu sababli uning metodologiyasi eksperimental tajribadan ko‘ra ilmiy adabiyotlarni tizimli izlash, saralash va tahlil qilishga asoslanadi.

Adabiyotlarni izlash uchun PubMed, Crossref va Google Scholar kabi ilmiy axborot manbalaridan foydalanish tavsiya etiladi. Qidiruvda quyidagi kalit iboralar qo‘llanadi:

- Structure–activity relationship of organic compounds.
- Quantitative structure–activity relationship.
- Molecular descriptors and biological activity.
- Stereochemistry and pharmacological activity.
- Machine learning in medicinal chemistry.

Kiritish mezonlari:

- organik birikmalarning kimyoviy tuzilishi va biologik faolligi o‘rtasidagi munosabatni o‘rganuvchi maqolalar;
- SAR va QSAR metodologiyasiga bag‘ishlangan ilmiy tadqiqotlar;
- molekulyar tavsiflovchilar, stereokimyo va biologik nishonlar bilan o‘zaro ta’sirni tahlil qiluvchi ishlar;
- bibliografik ma’lumotlari tekshirilishi mumkin bo‘lgan ilmiy nashrlar.

Tahlil mezonlari:

1. Kimyoviy tuzilish xususiyatlari.
2. Biologik faollikni baholash usuli.
3. Molekulyar tavsiflovchilar va hisoblash metodlari.
4. Natijalarning ishonchliligi va cheklovlari.
5. Eksperimental natijalar bilan hisoblash prognozlarining muvofiqligi.

Maqola tizimli sharh sifatida e’lon qilinishi rejalashtirilsa, qidiruv sanalari, ma’lumotlar bazalari, topilgan va saralangan maqolalar soni hamda chiqarib tashlash sabablari alohida qayd etilishi kerak. Hozirgi loyiha uchun hali bunday qidiruvning to‘liq statistikasi shakllantirilmagan.

NATIJALAR

3.1. Funksional guruhlarning biologik faollikka ta’siri

Funksional guruhlar organik molekulalarning elektron tuzilishi, qutbliligi, kislota-asos xususiyatlari va biologik muhit bilan o‘zaro ta’sirini belgilovchi muhim elementlardir.

Gidroksil, amino, karbonil, karboksil va amid guruhlari molekulalarning vodorod bog‘lari hosil qilish qobiliyatiga ta’sir qiladi. Bu xususiyat biologik

ISSN 3030-3907

nishonning faol markazida molekulaning joylashishi va bog‘lanish barqarorligida muhim rol o‘ynashi mumkin.

1-Jadval

Funksional guruh	Asosiy kimyoviy xususiyat	Biologik faollik uchun ehtimoliy ahamiyati
–OH	Vodorod bog‘i hosil qilish	Nishon bilan o‘zaro ta’sirni kuchaytirishi mumkin
$–NH_2$	Asoslik va vodorod bog‘lanishi	Ionli va qutbli o‘zaro ta’sirlarga ta’sir qiladi
–COOH	Kislotali xususiyat	Ionlanish va eruvchanlikni o‘zgartiradi
$–CONH_2$	Qutbli amid guruhi	Vodorod bog‘lari orqali bog‘lanishga yordam berishi mumkin
$–OCH_3$	Efir guruhi	Elektron taqsimoti va lipofillikni o‘zgartirishi mumkin
Galogen atomlari	Elektron va sterik ta’sirlar	Molekula selektivligi va metabolik xususiyatlariga ta’sir qilishi mumkin

Jadvaldagi ta’sirlar umumiy kimyoviy tamoyillarni ifodalaydi. Muayyan funksional guruh biologik faollikni albatta oshiradi, degan xulosa chiqarib bo‘lmaydi. Natija molekulaning umumiy tuzilishi va biologik nishonga bog‘liq.

3.2. Stereokimyo va biologik faollik

Organik birikmalarning stereokimyoviy tuzilishi ularning biologik faolligini belgilovchi muhim omillardan biridir. Xiral molekulalarning enantiomerlari bir xil atom tarkibi va bog‘lanish tartibiga ega bo‘lsa-da, fazoviy joylashuvi bilan farqlanadi.

Biologik retseptorlar, fermentlar va tashuvchi oqsillar xiral tuzilishga ega bo‘lganligi sababli, turli enantiomerlar bilan turlicha o‘zaro ta’sir qilishi mumkin. Natijada ularning biologik faolligi, selektivligi yoki metabolik xususiyatlari farqlanishi ehtimoli mavjud.

Shuning uchun biologik faol organik birikmalarni loyihalashda stereokimyoviy konfiguratsiyani aniqlash, tegishli enantiomerlarning xususiyatlarini solishtirish va zarur hollarda ularning biologik faolligini alohida baholash muhimdir.

3.3. Fizik-kimyoviy parametrlarning ahamiyati

Biologik faollik faqat molekulaning biologik nishon bilan bog‘lanishiga bog‘liq emas. Birikmaning biologik muhitga kirishi, erishi, membranalardan o‘tishi va organizmda saqlanishi ham muhimdir.

Asosiy fizik-kimyoviy parametrlar quyidagilardan iborat:

- **Lipofillik:** molekulaning lipidli muhitga moyilligini ifodalaydi.

ISSN 3030-3907

- **Suvda eruvchanlik:** birikmaning biologik suyuqliklarda mavjud bo‘lishiga ta’sir qiladi.
- **Ionlanish darajasi:** fiziologik pH sharoitida molekulaning zaryadlangan yoki neytral shaklda bo‘lishini belgilaydi.
- **Molekulyar massa:** diffuziya, membranalardan o‘tish va molekulyar tanib olishga ta’sir qilishi mumkin.
- **Vodorod bog‘lari donorlari va akseptorlari soni:** molekulaning qutbliligi va biologik nishonlar bilan o‘zaro ta’siriga ta’sir ko‘rsatadi.

Bu parametrlar o‘zaro bog‘liq bo‘lib, ularning birini alohida optimallashtirish har doim ham biologik faollikni yaxshilamaydi.

3.4. SAR va QSAR modellarining imkoniyatlari

SAR yondashuvi kimyoviy tuzilishdagi o‘zgarishlar biologik faollikka qanday ta’sir qilishini sifat jihatidan tushuntirishga yordam beradi. QSAR esa molekulyar tavsiflovchilar va biologik faollik o‘rtasidagi statistik yoki matematik bog‘liqlikni ifodalashga qaratilgan.

QSAR modelini ishlab chiqish odatda quyidagi bosqichlarni o‘z ichiga oladi:

1. Kimyoviy birikmalar va ularning ishonchli biologik faollik ma’lumotlarini yig‘ish.
2. Molekulyar tuzilishlarni standartlashtirish.
3. Molekulyar tavsiflovchilarni hisoblash.
4. Ma’lumotlarni o‘qitish va test to‘plamlariga ajratish.
5. Modelni yaratish va mustaqil ma’lumotlarda tekshirish.
6. Modelning aniqligi, qo‘llanish sohasi va cheklovlarini baholash.

Miqdoriy modellarni ishlab chiqishda ma’lumotlarning sifati, birikmalar xilma-xilligi va biologik faollikni o‘lchash usullarining muvofiqligi alohida ahamiyatga ega. Noto‘g‘ri tuzilgan model biologik faollikni ishonchsiz prognoz qilishi mumkin. SAR va QSAR yondashuvlarining metodologik ahamiyati ilmiy adabiyotlarda batafsil ko‘rib chiqilgan. PubMed

3.5. Sun’iy intellekt va hisoblash kimyosining roli

Zamonaviy hisoblash kimyosi katta hajmdagi molekulyar ma’lumotlarni tahlil qilish va istiqbolli birikmalarni dastlabki saralash imkonini beradi.

Mashinaviy o‘qitish algoritmlari molekulyar tavsiflovchilar, strukturaviy fragmentlar yoki molekulaning raqamli ifodalaridan foydalanib, ma’lum biologik faollik ko‘rsatkichlarini bashorat qilishga yordam beradi.

Molekulyar doking esa ligand va biologik nishon o‘rtasidagi ehtimoliy bog‘lanish holatlarini o‘rganishda qo‘llanadi. Biroq doking natijasidagi bog‘lanish energiyasi yoki modelning prognozi biologik faollikning bevosita isboti hisoblanmaydi.

ISSN 3030-3907

Tabiiy mahsulotlarni o‘rganishga bag‘ishlangan 2024-yilgi sharhda eksperimental sintez, biologik sinovlar va hisoblash usullarini o‘zaro to‘ldiruvchi yondashuv sifatida birlashtirish taklif qilingan. PubMed

MUHOKAMA.

Tahlil qilinayotgan ilmiy yondashuvlar organik birikmalarning biologik faolligini bitta strukturaviy parametr bilan izohlash mumkin emasligini ko‘rsatadi. Molekulaning biologik ta’siri uning funksional guruhlari, fazoviy konfiguratsiyasi, elektron xususiyatlari, fizik-kimyoviy parametrlari va biologik nishon bilan o‘zaro ta’sirining umumiy natijasidir.

Masalan, molekulaga qo‘shimcha qutbli guruh kiritilishi uning suvda eruvchanligini yaxshilashi mumkin, biroq ayrim hollarda membranadan o‘tishini kamaytirishi ehtimoli mavjud. Xuddi shuningdek, lipofillikning oshishi ayrim sharoitlarda biologik membranalardan o‘tishga yordam berishi mumkin, lekin eruvchanlik va farmakokinetik xususiyatlarga salbiy ta’sir ko‘rsatishi ham mumkin.

Stereokimyoviy o‘zgarishlar ham biologik nishon bilan bog‘lanish geometriyasini o‘zgartiradi. Shu sababli enantiomerlar yoki diastereomerlarning biologik xususiyatlarini faqat umumiy molekulyar formula asosida baholash yetarli emas.

QSAR modellarining afzalligi katta miqdordagi birikmalarni dastlabki saralash va kimyoviy modifikatsiyalarni rejalashtirish imkoniyatidir. Biroq modelning ishonchliligi o‘qitish ma’lumotlari, validatsiya usuli, kimyoviy fazoning qamrovi va biologik tajribalarning muvofiqligiga bog‘liq.

Shu munosabat bilan istiqbolli yondashuv quyidagi jarayonlarni birlashtirishdan iborat:

Kimyoviy tuzilishni tahlil qilish → molekulyar tavsiflovchilarni hisoblash → biologik faollikni prognozlash → eksperimental tekshirish → strukturani optimallashtirish.

Bunday integratsiyalashgan yondashuv biologik faol organik birikmalarni oqilona loyihalash uchun foydali metodologik asos yaratadi.

XULOSA.

Organik birikmalarning kimyoviy tuzilishi va biologik faolligi o‘rtasidagi bog‘liqlik murakkab, ko‘p omilli jarayon hisoblanadi. Funksional guruhlar, stereokimyoviy konfiguratsiya, elektron xususiyatlar, lipofillik, ionlanish va vodorod bog‘lari hosil qilish qobiliyati molekulalarning biologik nishonlar bilan o‘zaro ta’siriga ta’sir ko‘rsatadi.

SAR yondashuvi strukturaviy o‘zgarishlarning biologik faollikka ta’sirini tushuntirishga yordam bersa, QSAR va mashinaviy o‘qitish usullari ma’lum

ISSN 3030-3907

molekulyar tavsiflovchilar asosida biologik xususiyatlarni prognoz qilish imkonini beradi.

Hisoblash usullari eksperimental tadqiqotlarning o‘rnini to‘liq bosa olmaydi. Ularning natijalari tegishli validatsiya va biologik sinovlar bilan tasdiqlanishi kerak.

Kelgusidagi tadqiqotlarda kimyoviy tuzilish, fizik-kimyoviy xususiyatlar, biologik faollik va toksikologik ko‘rsatkichlarni birgalikda baholash yangi biologik faol organik birikmalarni izlash va optimallashtirish samaradorligini oshirishga xizmat qilishi mumkin.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR

1. Ancajas, C. M. F., Oyedele, A. S., Butt, C. M., & Walker, A. S. (2024). Advances, opportunities, and challenges in methods for interrogating the structure activity relationships of natural products. *Natural Product Reports, 41*(10), 1543–1578. https://doi.org/10.1039/D4NP00009A

2. Tong, W., Welsh, W. J., Shi, L., Fang, H., & Perkins, R. (2003). Structure-activity relationship approaches and applications. *Environmental Toxicology and Chemistry, 22*(8), 1680–1695. https://doi.org/10.1897/01-198

3. Medina-Franco, J. L., et al. (2022). Yes SIR! On the structure-inactivity relationships in drug discovery. *[Maqolaning to‘liq bibliografik ma’lumotlari nashriyot yozuvi asosida aniqlashtirilishi kerak.]* https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/35561964/

4. Burger, A., & Parulkar, A. P. (1966). Relationships between chemical structure and biological activity. *Annual Review of Pharmacology, 6*, 19–48. https://doi.org/10.1146/annurev.pa.06.040166.000315

5. National Center for Biotechnology Information. Structure–Activity Relationship. *Medical Subject Headings (MeSH).* https://www.ncbi.nlm.nih.gov/mesh/68013329

ISSN 3030-3907