TEREFTAL KISLOTASI VA UNING MONO- VA DIPROPARGIL EFIRLARINING BIOLOGIK FAOLLIKLARINI NAZARIY O‘RGANISH VA QIYOSIY TAQQOSLASH

Umirzoqov Islom Azimjonovich
O‘zbekiston Milliy Universiteti, Toshkent, O‘zbekiston, 4-kurs Neft va gaz kimyosi yo‘nalishi talabasi. umirzoqovislombek949@gmail.com
Mamajonov Jasur Shuxratovich
O‘zbekiston Milliy Universiteti, Toshkent, O‘zbekiston, PhD, katta o‘qituvchi
ximik.mamajonov@mail.ru
Abdugafurov Ibragimdjan Azizovich
O‘zbekiston Milliy Universiteti, Toshkent, O‘zbekiston, k.f.d., dotsent
ibragimaziz@yandex.ru

Annotatsiya: Ushbu maqolada PASS(online) dasturi orqali tereftal kislotasi va uning eterifikatsiya mahsuloti mono- va dipropargil efirlarining biologik faolliklari Pass online dasturi yordamida aniqlangan, shuningdek qiyosiy tahlil qilib o‘rganilgan.

Tayanch so‘zlar: farmakologik aktivlik, farmakologik inaktivlik. PASS (Prediction of activity spectra for substances), biologik faollik, ingibitor, mono propargiltereftalat, dipropargiltereftalat.

Аннотация: В данной статье с использованием программы PASS (Prediction of Activity Spectra for Substances, online) определена биологическая активность терефталевой кислоты и её продуктов этерификации — моно- и дипропаргиловых эфиров. Также проведён сравнительный анализ полученных результатов.

Ключевые слова: фармакологическая активность, фармакологическая неактивность, PASS (Prediction of Activity Spectra for Substances), биологическая активность, ингибитор, монопропаргилтерефталат, дипропаргилтерефталат.

Abstract: In this article, the biological activity of terephthalic acid and its esterification products — mono- and dipropargyl esters — was determined using the PASS (Prediction of Activity Spectra for Substances, online) program. A comparative analysis of the obtained results was also carried out.

Key words: pharmacological activity, pharmacological inactivity, PASS (Prediction of Activity Spectra for Substances), biological activity, inhibitor, monopropagyl terephthalate, dipropagyl terephthalate.

KIRISH. Almashingan arilpropargil efirlari, karbon kislotalarning propargil efirlari uch bog‘ va efir guruhi tutgan birikmalarning muhim turlaridan biri hisoblanadi. Hozirgi paytda ushbu guruh birikmlarining biologik faolliklarini

ISSN 3030-3907

o‘rganish yo‘nalishining intensiv rivojlanishiga zamonaviy fizik-kimyoviy tadqiqot usullarining takomillashib borishi sababchi bo‘lmoqda [1:34-38]. Eng asosiysi, molekulyar, hujayra va to‘qimalar darajasida biologik faol moddalarning ta’sir qilish mexanizmlari tadqiq qilinmoqda [2:236–248]. Bugungi kunda almashingan arilpropargil efirlar yoki propargil guruhi saqlagan kimyoviy preparatlar tibbiyotda va muhim biokimyoviy jarayonlarida ingibirlovchi va bir qancha kasalliklarga qarshi vosita sifatida keng qo‘llanilib kelinmoqda. Propargil efirlari, ayniqsa mono- va bipropargil efirlari birmuncha yuqori biologik faollikka ega bo‘lib, farmatsevtika va biomateriallar sohalarida muhim ahamiyat kasb etadi. Ularning biologik xususiyatlari asosan propargil guruhi (-C≡C-H), shuningdek efir bog‘lari (R-O-R’) orqali aniqlanadi [3: 115-116].

Ushbu tadqiqotlar mazkur birikmalarning biologik faolligini nazariy o‘rganish uning xossalarini bashorat qilish va tuzilishi nisbatan oddiyroq birikma uchun olingan eksperimental ma’lumotlar bilan solishtirish uchun o‘tkaziladi.

Shuni ta’kidlash kerakki, ushbu qiyosiy tadqiqot tereftal kislotasini strukturaviy o‘zgarishlari ushbu birikmalarning biologik faolligiga qanday ta’sir qilishini tushunishga qaratilgan. Tajribaviy va nazariy ma’lumotlarni o‘rganish orqali ushbu tadqiqot molekulyar tuzilish, birikmalarning biologik sistemalardagi samaradorligi va kuchiga qanday ta’sir qilishini chuqurroq tushunishga yordam beradi.

OLINGAN NATIJALAR TAHLILI. Tereftal kislotasi va uning eterifikatsiya mahsuloti monopropargil tereftalat va dipropargil tereftalatlarning biologik faolligini o‘rganish va ularning kimyoviy reaksiyalardagi ingibirlovchi va inson salomatligiga ta’siri borasida olib borilgan ilmiy tadqiqotlarda ushbu moddalarning bir qancha foydali xususiyatlari borligi aniqlangan, ammo ularning ta’sir qilish mexanizmi haligacha to‘liq o‘rganilmagan.

PASS online dasturi struktura-biologik faollik printsipida ishlaydi. Farmakologik faolligi Pa 0,7 qiymatidan yuqori bo‘lgan hollarda moddaning faolligi berilgan kasalliklarga nisbatan yuqori bo‘lish ehtimoli kuzatiladi. Boshlang‘ich moddadagi olingan natijalarda asosan moddaning turli xil ingibitorlarga nisbatan biologik faol ekanligi aniqlandi [4: 291-293.].

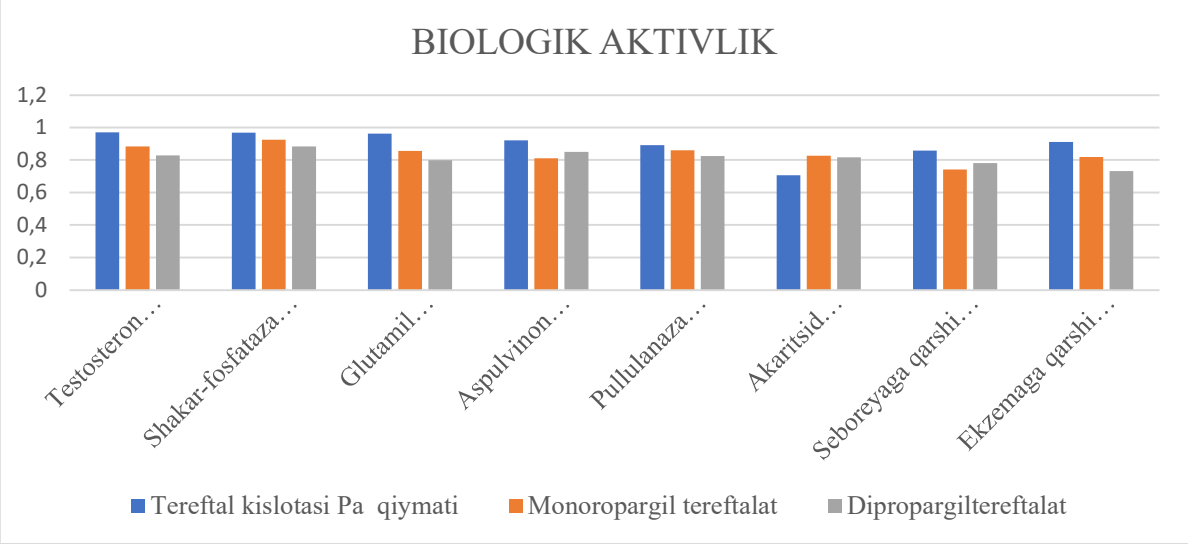
1-jadval

Tereftal kislotasi va uning eterifikatsiya mahsuloti propargiltereftalat va bipropargiltereftalatlarning PASS (online) dasturida olingan biologik faollik qiymatlari va ularning qiyosiy tahlili

t/r	Aktivlik aniqlangan soha	Tereftal kislotasi	Monoropargil tereftalat	Dipropargiltereftalat
		Pa qiymati		

ISSN 3030-3907

1	Testosteron 17beta-degidrogenaza (NADP+) fermenti ingibitori	0,969	0,883	0,828
2	Shakar-fosfataza fermenti ingibitori	0,967	0,925	0,882
3	Glutamil endopeptidaza II fermenti ingibitori	0,962	0,856	0,799
4	Aspulvinon dimetilalliltransferaza fermenti ingibitori	0,921	0,810	0,850
5	Pullulanaza fermenti ingibitori	0,890	0,859	0,824
6	Akaritsid (kanalarga qarshi vosita)	0,705	0,826	0,816
7	Seboreyaga qarshi vosita	0,857	0,741	0,780
8	Ekzemaga qarshi vosita	0,911	0,818	0,731



1-diagramma. PASS(online) dasturi orqali tereftal kislotasi va uning eterifikatsiya mahsuloti monopropargil tereftalat va dipropargil tereftalatlarning biologik faollik qiymatlari va ularning qiyosiy tahlili.

Testosteron 17β-dehidrogenaza (NADP⁺) fermenti steroid almashinuvida ishtirok etadi va testosteron hamda androstendion o‘rtasidagi o‘zaro aylanishni katalizlaydi. Ushbu fermentni inhibe qiluvchi moddalar androgen almashinuvi bilan bog‘liq kasalliklarni davolash yoki tadqiqot maqsadlarida ishlatilishi mumkin.

ISSN 3030-3907

Aspulvinon dimetilalliltransferaza fermenti – bu izoprenoid biosintezida ishtirok etuvchi ferment bo‘lib, Aspulvinone kabi moddalarning biosinteziga yordam beradi. Bu ferment prenyltransferaza sinfiga mansub bo‘lib, fenolik birikmalarning dimetilallil guruh bilan modifikatsiyasini katalizlaydi.

Pullulanaza fermenti – bu α-(1→6) glikozid bog‘larini parchalovchi debranching ferment bo‘lib, pullulan, amilopektin va boshqa murakkab polisaxaridlarni gidroliz qiladi. U kraxmal va glikogen parchalanishida muhim rol o‘ynaydi. Pullulanaza inhibitorlari uglevod metabolizmini nazorat qilish, bioyoqilg‘i ishlab chiqarish yoki bakterial fermentlarning faolligini bostirish uchun foydali bo‘lishi mumkin.

Seboreyaga qarshi vosita – bu yog‘ bezlarining haddan tashqari faoliyati natijasida yuzaga keladigan seboreya yoki seboreik dermatit kabi muammolarni davolash yoki boshqarish uchun ishlatiladigan dorivor preparatlardi. Ular yog‘ ishlab chiqarishni kamaytirish, yallig‘lanishni kamaytirish yoki bakteriyalarni yo‘q qilish orqali ta’sir qiladi.

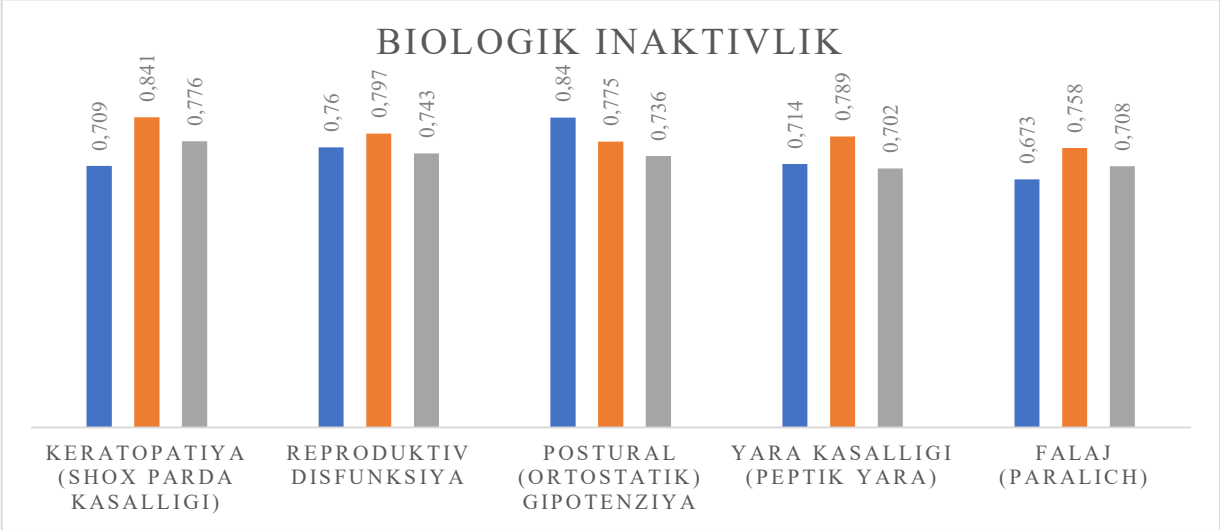
Ekzemaga qarshi vosita – ekzema va dermatit kabi teri yallig‘lanish kasalliklarini davolash yoki boshqarish uchun ishlatiladigan dorilar va moddalar. Ular qichishish, yallig‘lanish va teri quruqligini kamaytirishga yordam beradi

2-jadval

Tereftal kislotasi va uning eterifikatsiya mahsuloti mono(propargil) tereftalat va bis(propargil) tereftalat larning PASS (online) dasturida olingan biologik inaktivlik qiymatlari va ularning qiyosiy tahlili

t/r	**Inaktivlik aniqlangan soha**	**Tereftal kislotasi**	**Monopropargil tereftalat**	**Dipropargil tereftalat**
		Pa qiymati		
1	Keratopatiya (shox parda kasalligi)	0,709	0,841	0,776
2	Reproduktiv disfunksiya	0,760	0,797	0,743
3	Postural (ortostatik) gipotenziya	0,840	0,775	0,736
4	Yara kasalligi (peptik yara)	0,714	0,789	0,702
5	Falaj (Paralich)	0,673	0,758	0,708

ISSN 3030-3907



2-diagramma. PASS(online) dasturi orqali tereftal kislotasi va uning eterifikatsiya mahsuloti mono(propargil) tereftalat va bis(propargil) tereftalat larning biologik inaktivlik qiymatlari va ularning qiyosiy tahlili.

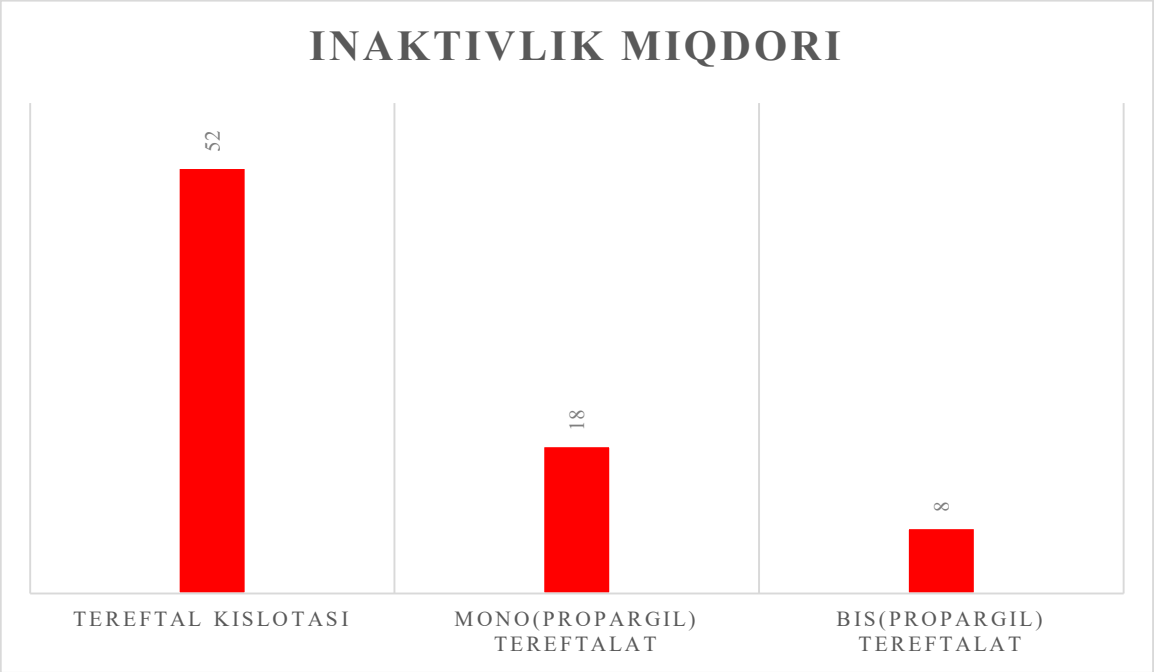
Reproduktiv disfunktsiya – bu insonning reproduktiv tizimining normal ishlashining buzilishi, natijada tug‘ilish yoki reproduktiv salomatlik bilan bog‘liq muammolar yuzaga keladi. Reproduktiv disfunktsiya erkaklar va ayollarda turli sabablarga ko‘ra rivojlanishi mumkin.

Postural (ortostatik) gipotenziya – bu turish yoki o‘tirgan holatdan tezda turganda qon bosimining keskin pasayishi natijasida bosh aylanishi, ko‘z oldi qorong‘ilashishi yoki hushdan ketish holati.

Yara kasalligi (peptik yara) – oshqozon yoki o‘n ikki barmoqli ichak shilliq qavatida hosil bo‘ladigan yara bo‘lib, u ko‘pincha *Helicobacter pylori* bakteriyasi yoki oshqozon kislotasining ortiqcha ishlab chiqarilishi natijasida yuzaga keladi.

Falaj (Paralich) – bu mushaklarning harakat qilish qobiliyatining yo‘qolishi bo‘lib, u miya, orqa miya yoki periferik nervlarning shikastlanishi natijasida yuzaga keladi. Falaj to‘liq yoki qisman bo‘lishi, vaqtinchalik yoki doimiy bo‘lishi mumkin.

ISSN 3030-3907



3-diagramma. PASS(online) dasturi orqali tereftal kislotasi va uning eterifikatsiya mahsuloti mono(propargil) tereftalat va bis(propargil) tereftalat larning biologik inaktivlik qiymatlari soni va o‘zaro qiyosiy tahlili.

TAJRIBA QISM. Tereftal kislotasi va uning eterifikatsiya mahsuloti mono(propargil) tereftalat va bis(propargil) tereftalat larning strukturasi Chem Office dasturining ChemDraw Ultra qismida mol faylida chizildi va PASS (online) dasturi yordamida ularning ayrim ingibirlovchi xossalari hamda ba'zi kasalliklarga qarshi farmakologik faolliklari va toksikliklari o'rganildi va bir-biri bilan solishtirildi [5].

XULOSA. Pass (online) dasturida tereftal kislotasining biologik faolligi o‘rganilganda barcha ingibitorlarga nisbatan *Testosterone 17beta-dehydrogenase (NADP+)* ingibitorining va uning eterifikatsiya mahsuloti mono(propargil) tereftalat va bis(propargil) tereftalatning biologik faolliklari o‘rganilganda esa barcha ingibitorlarga nisbatan, Sugar-phosphatase ingibitorining ancha biologik faol ekanligi aniqlandi, bundan tashqari, reproduktiv disfunktsiya, postural (ortostatik) gipotenziya, yara kasalligi (peptik yara), falaj kabi kasalliklariga biologik salbiy ta’sir etishi, ya’ni shu kabi tibbiy kasalliklarga nisbatan biologik inaktivlik qiymatlari qayd etildi va bir-biriga nisbatan qiyosiy solishtirildi. Ushbu tadqiqot mazkur birikmalarning biologik faolligini nazariy o‘rganish, uning xossalarini bashorat qilish va tuzilishi jihatidan oddiyroq birikma uchun olingan eksperimental ma’lumotlar bilan solishtirish uchun o‘tkaziladi. Shuni ta’kidlash kerakki, ushbu qiyosiy tadqiqot tereftal kislotasinining strukturaviy o‘zgarishlari ushbu birikmalarning biologik faolligiga qanday ta’sir qilishini nazariy tarafdan o‘rganish uchun olib borildi.

ISSN 3030-3907

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR

1. Abatov M.A. Theoretical study of the biological activity of 1,6-bis(4-bromophenoxy)hexa-2,4-diine . // European Journal of Interdisciplinary Research and Development. –2024. –V.31. –P. 34-38.
2. Catherine Tomaro-Duchesneau, Shyamali S., Meenakshi M., Coussa-Charley M., Imen K., Mitchell L.J., Alain L., Satya P. “Probiotic Ferulic Acid Esterase Active Lactobacillus fermentum NCIMB 5221 APA Microcapsules for Oral Delivery: Preparation and in Vitro Characterization”. // Pharmaceuticals. –2012. –V.5. № 2. –P. 236–248.
3. Abatov M.A., Abdugafurov I.A., Mamajonov J.SH. Pass online dasturi yordamida 1,6-bis(4-bromofenoksi)geksa-2,4-diin ning biologik faolligini nazariy o‘rganish. // O‘zbekiston Milliy universitetining kimyo fakulteti “Barqaror rivojlanishda kimyo faning roli” mavzusidagi professor-o‘qituvchilar, yosh olimlar, magistrantlar va iqtidorli talabalar ishtirokidagi ilmiy-amaliy anjumani to‘plami. –2024. –P. 115-116.
4. Abatov M.A., Abdugafurov I.A., Mamajonov J.SH. 1-(4-bromfenoksi)propin-2 va uning dimerizatsiya mahsuloti - 1,6-bis(4-bromfenoksi)geksadiin-2,4 ning biologik faolliklarini nazariy o‘rganish va qiyosiy taqqoslash. // O‘zMU xabarlari ilmiy jurnali. –2024. –V.3. –I.2. –P. 291-293.
5. https://www.way2drug.com/PassOnline.

ISSN 3030-3907