

Monoxlorsirka kislotasini ftalidometilefirining biologik faolligini nazariy o'rganish

Abrorbek Adhamjon o'g'li Nasirdinov
Sherzod Baxodirovich To'rayev
Hamza Sayidmurodovich Toshov
O'zbekiston Milliy universiteti

Annotatsiya: Bugungi kunda kimyoda yangi moddalar sintez qilingani sari moddaning fizik-kimyoviy xossalrigina qolmay uning biologik faolligini tekshirish talab darajasida bo'lmoqda. Biologik faolligini o'rganishga esa juda ko'p mablag' va vaqt kerak. Buni nazariy jihatdan o'rganishda Pass (on-line) dasturi kerak hisoblanadi. Ushbu tadqiqotimizda Monoxlorsirka kislotasining ftalimidometil efirining biologik faolligini Pass (on-line) dasturida tekshirish natijalari keltirilgan.

Kalit so'zlar: monoxlorsirka kislotasining ftalimidometil efiri, PASS (on-line), farmakologik faollik, Pa qiymati, Pi qiymati

Theoretical study of the biological activity of monochloroacetic acid phthalidomethylether

Abrorbek Adhamjon o'glu Nasirdinov
Sherzod Bakhodirovich Torayev
Hamza Sayidmurodovich Tashov
National University of Uzbekistan

Abstract: Today, as new substances are synthesized in chemistry, not only the physico-chemical properties of the substance, but also its biological activity, are in demand. Studying its biological activity requires a lot of money and time. The Pass (on-line) program is considered necessary for theoretical study. In this study, the results of testing the biological activity of phthalimidomethyl ester of monochloroacetic acid in the Pass (on-line) program are presented.

Keywords: phthalimidomethyl ether of monochloroacetic acid, PASS (on-line), pharmacological activity, Pa value, Pi value

Kirish: Pass on-line dasturi organik birikmalarning va biologik faollik turlari haqida 300 mingdan va 4 mindan ziyod (mos ravishda) ma'lumotlarni o'z ichiga oladi. Bu dasturi ishlash prinsipi moddaning strukturasi asoslanib 95% gacha biologik faolligini o'rganish mumkin. Bundan tashqari Pa qiymati moddaning

farmakologik faolligi, P_i esa kasallik nisbatan faol bo‘lmagan ko‘rsatkichi. $P > 0,71$ qiymatda namunadagi moddamiz shu kasallikka nisbatan yuqori farmokologik xususiyatini ko‘rsatadi [1-2].

Olingan natijalar tahlili: Pass (on-line) dasturida olingan ma’lumotlarga asoslanib Monoxlorsirka kislotasining ftalimidometil efiri ko‘p kasalliklarga qarshi ko‘roq ingibitor faoliyatini namoyon qilishi aniqlandi. Quyidagi 1,2-diagrammalarda olingan natijalar va kasalliklar haqida ma’lumotlar keltirilgan.

1-jadval

Monoxlor sirkakislotasi ftalimidometilefirining Pass Online da olingan aktivlik jadvali

Pa	Pi	
0,820	0,005	2-Hydroxyomuconate-semialdehyde hydrolase inhibitor
0,760	0,017	Antineoplastic
0,745	0,004	Opheline kinase inhibitor
0,745	0,004	Taurocyamine kinase inhibitor
0,731	0,014	Pseudolysin inhibitor



1-diagramma. Aktivlik diagrammasi

2-Hydroxyomuconate-semialdehyde hydrolase inhibitor.

2-Hidroksimukonat-semialdegid gidrolaza (HMSH) inhibitorlari HMSH fermenti faolligini oldini olish yoki sekinlashtirish uchun ishlatiladigan birikmalar sinfidir. Ushbu ferment aromatik birikmalarning mikrobal degradatsiyasida ishtirok etadi va uning inhibitsiyonu atrof-muhitni qayta tiklash va biotexnologiyada qo‘llanilishi mumkin.

HMSH inhibitorlarining ba’zi potentsial foydalanishlari quyidagilarni o‘z ichiga oladi:

- Ifloslangan muhitda aromatik ifloslantiruvchi moddalarning parchalanishini nazorat qilish
- Bioyoqilg‘i ishlab chiqarish yoki bioremediatsiya kabi biotexnologik jarayonlar uchun mikrobal metabolizmni modulyatsiya qilish
- HMSH fermentining biologik funksiyasi va regulyatsiyasini o‘rganish.

Antineoplastic. Antineoplastik yangi to'qimalarning g'ayritabiiy o'sishi yoki o'smalari bo'lgan neoplazmalarning rivojlanishi va o'sishini inhibe qilish yoki oldini olish uchun ishlatiladigan dorilar yoki davolanishni anglatadi. Ushbu dorilar kimyoterapiya vositalarini, maqsadli terapiyani, immunoterapiyani yoki gormon terapiyasini o'z ichiga olishi mumkin va ular turli xil saraton turlarini davolash uchun ishlatiladi. Ular saraton hujayralarini yo'q qilish yoki ularning o'sishi va tanada tarqalishini oldini olish orqali ishlaydi.

Opheline kinase inhibitor. Ofelin kinaz inhibitori saraton hujayralarining o'sishi va tarqalishida ishtirok etadigan o'ziga xos fermentlarni maqsad qilgan antineoplastik agentning bir turi. Ushbu inhibitorlar hujayra o'sishi va ko'payishini tartibga soluvchi signal yo'llarida ishtirok etadigan oqsillar bo'lgan ofelin kinazlarning faolligini blokirovka qilish orqali ishlaydi. Ushbu fermentlarni inhibe qilish orqali ofelin kinaz inhibitorlari saraton hujayralarining o'sishini to'xtatish yoki sekinlashtirishga yordam beradi, bu esa o'smalarning qisqarishiga va bemorning natijalarini yaxshilashga olib keladi.

Taurocyamine kinase inhibitor. Taurocyamine kinase inhibitori - bu turli xil hujayra jarayonlarida ishtirok etadigan ferment bo'lgan taurocyamine kinase faolligini maqsad qilib qo'yadigan va inhibe qiluvchi dori turi. Ushbu fermentning ta'sirini blokirovka qilish orqali ushbu inhibitorlar terapevtik maqsadlarda, masalan, ayrim kasalliklar yoki sharoitlarni davolashda ishlatilishi mumkin.

Pseudolysin inhibitor. Pseudolizin - bu *Pseudomonas aeruginosa* tomonidan ishlab chiqarilgan metalloproteaza fermenti, odamlarda jiddiy infeksiyalarni keltirib chiqarishi bilan mashhur. Tadqiqotlar shuni ko'rsatdiki, pseudolizin faolligini inhibe qilish *Pseudomonas aeruginosa* infeksiyalariga qarshi kurashish uchun yangi antibiotiklar yoki infeksiyaga qarshi vositalarni ishlab chiqish uchun potentsial maqsad bo'lishi mumkin.

Bir nechta birikmalar potentsial pseudolizin ingibitorlari, jumladan, kichik molekulalar va peptidlar sifatida aniqlangan. Ushbu inhibitorlar pseudolizinning faol joyiga bog'lanib, uning fermentative faolligini oldini oladi va shu bilan *Pseudomonas aeruginosa* virulentligini kamaytiradi.

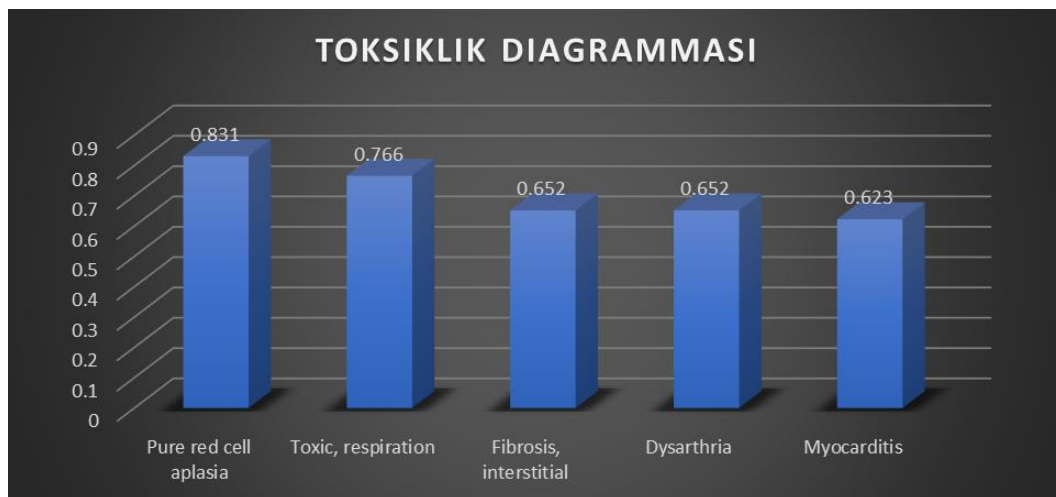
Pseudolizin ingibitorlarini ishlab chiqish faol tadqiqot yo'nalishi bo'lib, samarali birikmalarning kashf etilishi *Pseudomonas aeruginosa* infeksiyalarini, ayniqsa, hozirgi vaqtda mavjud antibiotiklarga chidamli bo'lganlarni davolashning yangi usullariga olib kelishi mumkin.

2-jadval

Monoxlor sirkakislotsi ftalimidometilefirining PassOnline da olingan toksiklik jadvali.

Pa	Pi	
0,831	0,018	Pure red cell aplasia
0,766	0,029	Toxic, respiration

0,652	0,022	Fibrosis, interstitial
0,652	0,033	Dysarthria
0,623	0,012	Myocarditis



2-diagramma. Toksiklik diagrammasi

Pure red cell aplasia. Sof qizil hujayra aplaziyasi kamdan-kam uchraydigan kasallik bo‘lib, suyak iligida qizil qon tanachalari ishlab chiqarilmasligi, anemiyaga olib keladi. Sof qizil hujayra aplaziyasining bir nechta potentsial sabablari, jumladan, virusli infektsiyalar, otoimmün kasalliklar, dori-darmonlar va ayrim saraton turlari mavjud. Vaziyat ham tug‘ma yoki idiopatik bo‘lishi mumkin, ya’ni sabab noma’lum.

Sof qizil hujayra aplaziyasini davolash odatda asosiy sababni bartaraf etishni o‘z ichiga oladi, masalan, bezovta qiluvchi dori-darmonlarni to‘xtatish yoki asosiy infektsiyani davolash. Ba’zi hollarda anemiyani davolash uchun immunosupressiv terapiya yoki qon quyish kerak bo‘lishi mumkin. Og‘ir holatlarda gematopoetik ildiz hujayralari transplantatsiyasi ko‘rib chiqilishi mumkin.

Sof qizil hujayra aplaziyasini davolashning mumkin bo‘lgan usullari, shu jumladan psevdolizin inhibitörlerini qo‘llash bo‘yicha tadqiqotlar davom etmoqda. Psevdolizin inhibitorlari qizil hujayra aplaziyasining asosiy mexanizmlarini bartaraf etish uchun mumkin bo‘lgan terapevtik yondashuv sifatida o‘rganilmoqda.

Toxic, respiration. Sof qizil hujayra aplaziyasi (PRCA) - bu suyak iligida qizil qon hujayralari ishlab chiqarilmasligi bilan tavsiflangan kam uchraydigan kasallik. Bu og‘ir anemiyaga olib keladi va charchoq, zaiflik va nafas qisilishi kabi alomatlariga olib kelishi mumkin. Davolash, odatda, avtoimmün kasalliklar, infektsiyalar, dori-darmonlar yoki toksik ta’sirlarni o‘z ichiga olishi mumkin bo‘lgan asosiy sababni bartaraf etishni o‘z ichiga oladi.

Fibrosis, interstitial. Fibroz va interstitsial o‘pka kasalligi nafas olish tizimiga ta’sir qiladigan jiddiy holatlardir.

Fibroz organda ortiqcha tolali biriktiruvchi to‘qimalarning shakllanishiga ishora qiladi, bu uning funksiyasini buzishi mumkin. O‘pkada fibroz o‘pka to‘qimalarining

chandiqlari va qattiqlashishiga olib kelishi mumkin, bu o'pkaning nafas olish vaqtida to'g'ri kengayishini va qisqarishini qiyinlashtiradi.

Interstitial o'pka kasalligi havo qoplari orasidagi o'pka to'qimalarining yallig'lanishi va chandiqlarini o'z ichiga oladi. Bu nafas olishda qiyinchilik va nafas olish paytida kislorod almashinuvining pasayishiga olib kelishi mumkin.

Dysarthria. "Dizartria" - nutqda ishlatiladigan zaif yoki yomon muvofiqlashtirilgan mushaklar tufayli so'zlarni artikulyatsiya qilishda qiyinchilik bilan tavsiflangan nutq buzilishi. Bu nutqning noto'g'ri yoki tushunarsiz bo'lishiga olib kelishi mumkin va insult, miya shikastlanishi yoki Parkinson kasalligi yoki ko'p skleroz kabi kasalliklar kabi turli nevrologik kasalliklar sabab bo'lishi mumkin. Dizartriyaning davolash asosiy sababga qarab fizik terapiya, nutq terapiyasi yoki tibbiy aralashuvni o'z ichiga olishi mumkin.

Myocarditis. Miyokardit, yurak mushagining (miokard) yallig'lanishini anglatadi. Bu holat virusli infektsiya, bakterial infektsiya, otoimmün reaksiya yoki ma'lum toksinlar ta'siridan kelib chiqishi mumkin. Miyokardit ko'krak og'rig'i, nafas qisilishi, tez yoki tartibsiz yurak urishi va charchoq kabi belgilarga olib kelishi mumkin. Miyokarditning og'ir holatlari yurak etishmovchiligi, anormal yurak ritmi yoki to'satdan yurak o'limiga olib kelishi mumkin. Miyokarditni davolash dam olishni, yallig'lanishni kamaytirish va simptomlarni bartaraf etish uchun dori-darmonlarni va og'ir holatlarda mexanik yordamni yoki yurak transplantatsiyasini o'z ichiga olishi mumkin.

Tajriba qism:

PassOnline dasturida ishlashda dastlab registratsiyadan o'tiladi. So'ngra "GO for prediction" bosib akkauntimizga kiramiz va "Predict new compound" ni bosib "Marvin JS" da moddamizni chizib predict qismini bosganimizda bizga moddamizni biologik faolligiga doir jadval chiqarib beradi, undan keyin esa moddani toksiklik jadvali ham olinadi.

Xulosa:

Pass (on-line) dasturida Monoxlorsirka kislotasining ftalimidometil efirining biologik faolliklari o'rganilganda keltirilgan kasalliklar orasida "2-Hydroxymuconate-semialdehyde hydrolase inhibitor" uchun yuqori najja kuzatildi. Bundan tashqari modda sezilarli darajada toksik ta'sirga ega ekanligi "Pure red cell aplasia" uchun eng yuqori toksiklik ta'siriga ega ekanligi aniqlandi.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. Филимонов Д.А., Лагунин А.А., Глориозова Т.А., Рудик А.В., Дружиловский Д.С., Погодин П.В., Поройков В.В. Предсказание спектров биологической активности органических соединений с помощью веб-ресурса

PASS ONLINE // Химия гетероциклических соединений. - 2014. - №3.- С.483-499.

2. Madina Zokirjon qizi Sulaymanova, Hamza Sayidmurodovich Toshov, Alisher Xamidovich Xaitbaev. Betulin va uning ba'zi bir hosilalarining biologik faolligini PASS (online) dasturida tekshirish. Science and Education. 2021.11.28. №2-11. 373-376 B.

3. Eshqulov X., Mansurov D., Ismailova D., Toshov H. Di(para-aminofenil-1,3,4-oksadiazolion-2)gossipol shiff asosining saraton, herpes va zika viruslariga nisbatan biologik faolligini autodock tools dasturi yordamida o'rganish. O'ZBEKISTON MILLIY UNIVERSITETI XABARLARI, 2023, [3/2]. ISSN 2181-7324. Ст. 363