

АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ УЗБЕКИСТАН

**ИНСТИТУТ БИООРГАНИЧЕСКОЙ
ХИМИИ ИМ. АКАДЕМИКА
А.С. САДЫКОВА**

**МАТЕРИАЛЫ МЕЖДУНАРОДНОЙ НАУЧНОЙ
КОНФЕРЕНЦИИ**

**АКТУАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ
РАЗВИТИЯ
БИООРГАНИЧЕСКОЙ
ХИМИИ**

13 – 14 ноября 2023 г.

г. Ташкент



Редакционная коллегия:

Ощепкова Ю.И. – д.х.н., профессор, заместитель директора по научной работе ИБОХ АН РУз; Зиявитдинов Ж.Ф. – д.х.н., профессор, заведующий лабораторией; Матчанов А.Д. – д.х.н., профессор, заведующий лабораторией; Ашуров Ж.М. – д.х.н., профессор, заведующий лабораторией; Шомуратов Ш.А. – д.х.н., заведующий лабораторией; Тагайалиева Н.А. – к.б.н., заведующий лабораторией; Гафуров М.Б. – д.х.н., профессор; Хашимова Н.Р. – д.б.н.; Хашимова З.С. – д.б.н.; Махмудов С.Р. – к.т.н., заведующий лабораторией; Гайибов У.Г. – к.б.н.

Ответственный редактор:

Ощепкова Ю.И. – д.х.н., профессор, заместитель директора по научной работе ИБОХ АН РУз.

Сборник трудов международной научной конференции «Актуальные проблемы развития биоорганической химии»: материалы конференции (13–14 ноября 2023 г.). — Ташкент, 2023. — 483 с.

В сборник вошли материалы выступлений, докладов и тезисы публикаций ученых по итогам международной научной конференции, посвященные обсуждению современного состояния и актуальных проблем развития биоорганической химии, молекулярной медицины и биотехнологии.

Материалы публикуются в авторской редакции. Авторы опубликованных материалов несут ответственность за подбор и точность приведенных фактов, цитат, собственных имен, статистических данных и прочих сведений.

2-ТРИФТОРАЦЕТИЛЦИКЛОГЕКСАНОН
БЕНЗОИЛГИДРАЗОНИНИНГ PASS ONLINE ДАСТУРИДА АНАЛИЗИ
ВА МОЛЕКУЛЯР ДОКИНГИ

Авезов Қ.Ғ., Умаров Б.Б., Ганиев Б.Ш., Холиқова Г.Қ.

Ўзбекистон Республикаси, Бухоро ш., 200117, М.Иқбо кўчаси 11, Бухоро давлат
университети, b.sh.ganiyev@buxdu.uz

2-трифторацетилциклогексанон бензоилгидразонининг биологик фаоллигини PASS – компьютер дастури ёрдамида башорат қилинди. Бу дастур PASS (Prediction Activity Structure Substances – Моддаларнинг тузилишига асосан фаоллигини башорат қилиш) Россиялик олимлар В.В. Пороиков ҳамда Д.А. Филимоновлар томонидан яратилган [1]. 2-трифторацетилциклогексанон бензоилгидразони юқори даражада ичакнинг яллиғланиш касаллигини даволаш, антиасматик, антиаритрик фаолликни намоён қилиши аниқланди, таҳлил натижалари 1-жадвалда келтирилган.

1-жадвал

2-трифторацетилциклогексанон бензоилгидразонининг биологик фаоллик кўрсаткичлари

Бирикма	P_a	P_i	Биологик фаоллик	
H_2L^1	0,934	0,003	Inflammatory Bowel disease treatment	Ичакнинг яллиғланиш касалликларини даволаш
	0,868	0,005	Antiarthritic	Антиартритик
	0,833	0,004	Antipsoriatic	Антипсориастик
	0,823	0,005	Antiasthmatic	Антиасматик
	0,775	0,005	Analgesic, non-opioid	Аналгезик, опиоид бўлмаган

Молекуляр докинг усули кимё ва биологияда рецептор-субстратнинг ўзаро таъсирига асосланган янги биологик фаол бирикмаларни аниқлаш учун кенг қўлланилади. Бундан ташқари, усул бизга лиганд ёки комплекснинг макромолекула билан ўзаро таъсир механизмини ўрганишга ва оксилнинг фаол марказида лиганднинг қулай конформациясини топишга имкон беради. Шуни инобатга олган ҳолда биз 2-трифторацетилциклогексанон бензоилгидразонининг Fusarium солани (PDB ID: 3QPC) замбуруғидан олинган оксил билан CB-Dock2 онлайн сервери ёрдамида ўзаро таъсирини ўргандик [2]. Ушбу онлайн серверда дастлаб оксилнинг лиганд билан таъсирлашиш бўшлиқлари изланди, бунда 147, 143, 104, 100 ва 76 Å³ ҳажмдаги 5 та фаол бўшлиқ маркази аниқланди. Сўнг лиган ва оксил серверга юкланиб, молекуляр докинг амалга оширилди. Оксил ва лиганднинг ўзаро таъсирдан юқоридаги келтирилган бўшлиқларга мос равишда -6,5; -5,0; -5,9; -5,6 ва -6,0 kcal/mol энергияга эга фаоллик кузатилди. Натижалар шуни кўрсатадики ҳажми энг катта ва энг кичик бўшлиқда лиганднинг фаоллиги юқори бўлади.

Шунингдек, ушбу лиганднинг ArgusLab дастурида ҳам лиганд-оксил таъсирига кўра молекуляр докинг амалга оширилди. ArgusLab дастурида олинган натижаларга кўра лиганд 3QPC оксида 59 конформацияда таъсирлашиб, бунда -9,02522 kcal/mol энергияга эга фаоллик намоён этди.

Адабиётлар

[1] Filimonov D. A. et al. Prediction of the biological activity spectra of organic compounds using the PASS online web resource //Chemistry of Heterocyclic Compounds. – 2014. – Т. 50. – С. 444-457.

[2] Liu, Yang, et al. "CB-Dock2: Improved protein–ligand blind docking by integrating cavity detection, docking and homologous template fitting." Nucleic acids research 50. W1 (2022): W159-W164.

Зиявиденова С.С., Еникеева З.М., Агзамова Н.А., Холтураева Н.Р., Ибрагимов А.А.....	341
ПАТОМОРФОЛОГИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВНУТРЕННИХ ОРГАНОВ КРЫС ПРИ ИЗУЧЕНИИ ТОКСИКОЛОГИИ ПРОТИВООПУХОЛЕВОГО ПРЕПАРАТА «ДЭКОГЛИЦ»	
Нишанов Д.А., Мадалиев А.А. Еникеева З.М. Зиявиденова С.С.....	342
СРАВНЕНИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ НОВОГО ПРЕПАРАТА КОЛХИЦИНОЛ-2 НА СИНТЕЗ ДНК/РНК ОПУХОЛИ ПОЧКИ ЧЕЛОВЕКА И ОПУХОЛИ САРКОМЫ	
180	
Салихов Ф.С., Ибрагимов А.А., Еникеева З.М., Агзамова Н.А., Камышов С.В...	343
ДНК-АПТАМЕРЫ ТАРГЕТНО ВОЗДЕЙСТВУЮЩИЕ НА ДЕСТРУКЦИЮ ОПУХОЛЕВОЙ КЛЕТКИ	
Ибрагимов А.А., Кадирова Д.А., Еникеева З.М., Бойко Е.В., Гафур-Ахунов М.А., Набиева Д.У., Тё Е.М., Максудов М.З.....	345
ИЗУЧЕНИЕ ПРОИЗВОДНОГО АЛКАЛОИДА АНАБАЗИНА В КАЧЕСТВЕ ПОТЕНЦИАЛЬНОГО ИНГИБИТОРА ОСНОВНОЙ ПРОТЕАЗЫ M _{PRO} SARS-COV-2	
Тойгамбекова Н.Н., Мукушева Г.К., Жаналиева С. А., Нурмаганбетова М.С....	347
МОНИТОРИНГ РАЗМЕРОВ ЧАСТИЦ ЛИПОСОМАЛЬНОЙ ФОРМЫ АНТИАРИТМИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТОВ МЕТОДОМ ДИНАМИЧЕСКОГО РАССЕЙЯНИЯ СВЕТА	
Узбеков В.В., Ощепкова Ю.И., Салихов Ш.И.....	350
FAVIRAVIR VA LAMIVUDIN ORGANIK TUZINING AYRIM VIRUS OQSIL MOLEKULALARIGA BOG‘LANISHINI MOLEKULAR DOKING USULIDA O‘RGANISH	
Choriyev O.I, Ashurov J.M., Yeshimbetov A.G., Ibragimov B.T.....	352
2-ТРИФТОРАЦЕТИЛЦИКЛОГЕКСАНОН БЕНЗОИЛГИДРАЗОНИНГ PASS ONLINE ДАСТУРИДА АНАЛИЗИ ВА МОЛЕКУЛЯР ДОКИНГИ	
Авезов Қ.Ғ., Умаров Б.Б., Ганиев Б.Ш., Холикова Г.Қ.....	355
SYNTHESIS OF NEW AMIDES OF 18B-H GLYCYRRHETINIC ACID AND THEIR MOLECULAR DOCKING	
Khamdamova M.A., Baikhanova N.X., Gafurov M.B., Babaev B.N., Yuldashev Kh.A.....	357
IN SILICO STUDY THE COMPLEX OF TELOCINOBUFAGIN AND M _{PRO} OF SARS-COV-2	
Rajabov M.R., Mirakhmetova Z.Zh., Kayumov M.B., Tashmukhamedov M.S., Mirzaakhmedov Sh.Ya.....	359
GAMABUFOTALIN AS A 3CL-PROTEASE INHIBITOR: A COMPUTATIONAL APPROACH	
Rajabov M.R., Mirakhmetova Z.Zh., Kayumov M.B., Tashmukhamedov M.S., Mirzaakhmedov Sh.Ya.....	361
p300 ENZYME INHIBITORY ACTIVITY OF LATRODECTUS MACTANS VENOM AND ITS FRACTIONS	
Mukhamedov N.R., Kayumov M.B., Azammatkhoyayev A.A., Tashmukhamedov M.S., Mirzaakhmedov Sh.Ya.....	363
ИЗУЧЕНИЕ ТРАНСКРИПЦИОННОЙ РЕГУЛЯЦИИ ДЕЙОДИНАЗЫ 2-ГО ТИПА МЕТОДОМ IN SITU ГИБРИДИЗАЦИИ	
Артыкбаева Г.М.....	366