



**ЎЗБЕКИСТОН RESPUBLIKASI  
ОЛИЙ ТАЪЛИМ, ФАН ВА ИННОВАЦИЯЛАР ВАЗИРЛИГИ**

**ЎЗБЕКИСТОН ТИББИЙ-ИЛМИЙ ФАОЛИЯТ БИЛАН  
ШУЎУЛЛАНУВЧИЛАР “ТАБОБАТ” АКАДЕМИЯСИ**

**RESPUBLIKA XALQ TABOBATI ILMIIY-AMALIY MARKAZI**

**ЗАХИРИДДИН МУХАММАД БОБУР НОМИДАГИ  
АНДИЖОН ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ**

**ТОВАРЛАР КИМЌСИ ХАМДА ХАЛҚ ТАБОБАТИ  
МУАММОЛАРИ ВА ИСТИҚБОЛЛАРИ  
Мавзусидаги X Халқаро илмий-амалий конференция  
материаллари (Андижон, 2023, 14-15 сентябрь)**

**МИНИСТЕРСТВО ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ, НАУКИ И ИННОВАЦИЙ  
РЕСПУБЛИКИ УЗБЕКИСТАН**

**АКАДЕМИЯ «ТАБОБАТ» НАУЧНО-МЕДИЦИНСКОЙ  
ДЕЯТЕЛЬНОСТИ УЗБЕКИСТАНА**

**РЕСПУБЛИКАНСКИЙ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКИЙ ЦЕНТР  
НАРОДНОЙ МЕДИЦИНЫ**

**АНДИЖАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ИМЕНИ ЗАХИРИДДИНА МУХАММАДА БАБУРА**

**ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ ХИМИИ  
ТОВАРОВ И НАРОДНОЙ МЕДИЦИНЫ  
Материалы X Международной научно-практической  
конференции (Андижан, 2023, 14-15 сентября)**

**MINISTRY OF HIGHER EDUCATION, SCIENCE AND INNOVATION  
OF THE REPUBLIC OF UZBEKISTAN**

**ACADEMY "TABOBAT" OF SCIENTIFIC AND MEDICAL  
ACTIVITIES OF UZBEKISTAN**

**REPUBLICAN SCIENTIFIC AND PRACTICAL CENTER OF FOLK MEDICINE**

**ANDIJAN STATE UNIVERSITY  
NAMED AFTER ZAKHIRIDDIN MUHAMMAD BABUR**

**PROBLEMS AND PROSPECTS OF CHEMISTRY OF GOODS AND FOLK MEDICINE  
Materials of the Xth International Scientific and Practical Conference  
(Andijan, 2023, on September 14-15)**

**ЎЗБЕКИСТОН РЕСПУБЛИКАСИ**  
**ОЛИЙ ТАЪЛИМ, ФАН ВА ИННОВАЦИЯЛАР ВАЗИРЛИГИ**  
**ЎЗБЕКИСТОН ТИББИЙ-ИЛМИЙ ФАОЛИЯТ БИЛАН**  
**ШУҒУЛЛАНУВЧИЛАР “ТАБОБАТ” АКАДЕМИЯСИ**  
**РЕСПУБЛИКА ХАЛҚ ТАБОБАТИ ИЛМИЙ-АМАЛИЙ МАРКАЗИ**  
**ЗАҲИРИДДИН МУҲАММАД БОБУР НОМИДАГИ**  
**АНДИЖОН ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ**

**ТОВАРЛАР КИМЁСИ ҲАМДА ХАЛҚ ТАБОБАТИ**  
**МУАММОЛАРИ ВА ИСТИҚБОЛЛАРИ**  
**Мавзусидаги X Халқаро илмий-амалий конференция материаллари**  
**(Андижон, 2023, 14-15 сентябрь)**

**МИНИСТЕРСТВО ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ, НАУКИ И ИННОВАЦИЙ**  
**РЕСПУБЛИКИ УЗБЕКИСТАН**  
**АКАДЕМИЯ «ТАБОБАТ» НАУЧНО-МЕДИЦИНСКОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ**  
**УЗБЕКИСТАНА**

**РЕСПУБЛИКАНСКИЙ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКИЙ ЦЕНТР НАРОДНОЙ**  
**МЕДИЦИНЫ**

**АНДИЖАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ**  
**ЗАХИРИДИНА МУХАММАДА БАБУРА**

**ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ ХИМИИ ТОВАРОВ И**  
**НАРОДНОЙ МЕДИЦИНЫ**  
**Материалы X Международной научно-практической конференции**  
**(Андижан, 2023, 14-15 сентября)**

**MINISTRY OF HIGHER EDUCATION, SCIENCE AND INNOVATION OF THE**  
**REPUBLIC OF UZBEKISTAN**

**ACADEMY "TABOBAT" OF SCIENTIFIC AND MEDICAL ACTIVITIES OF**  
**UZBEKISTAN**

**REPUBLICAN SCIENTIFIC AND PRACTICAL CENTER OF FOLK MEDICINE**

**ANDIJAN STATE UNIVERSITY**  
**NAMED AFTER ZAKHIRIDDIN MUHAMMAD BABUR**

**PROBLEMS AND PROSPECTS OF CHEMISTRY OF GOODS**  
**AND FOLK MEDICINE**

**Materials of the X<sup>th</sup> International Scientific and Practical Conference**  
**(Andijan, 2023, on September 14-15)**

**PASS ONLINE, CB-DOCK2, ARGUSLAB ДАСТУРЛАРИДА 2-ТРИФТОРАЦЕТИЛЦИКЛОГЕКСАНОН БЕНЗОИЛГИДРАЗОНИНИНГ АНАЛИЗИ ВА МОЛЕКУЛЯР ДОКИНГИ**

**Қ.Ғ. Авезов, Б.Б. Умаров, Б.Ш. Ганиев, Г.Қ. Холиқова**  
*Ўзбекистон Республикаси, Бухоро ш., 200117, М.Иқбо кўчаси 11, Бухоро давлат университети, [b.sh.ganiyev@buxdu.uz](mailto: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	Антипсориатик
	0,823	0,005	Antiasthmatic	Антиастматик
	0,775	0,005	Analgesic, non-opioid	Аналгезик, опиоид бўлмаган

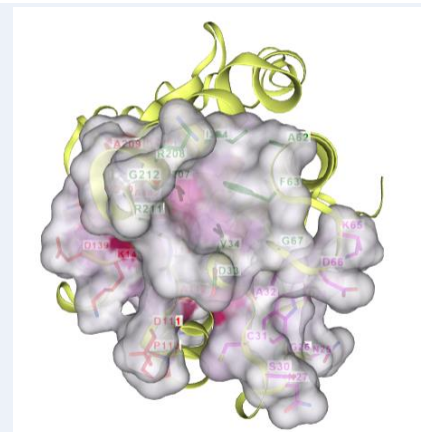
Молекуляр докинг усули кимё ва биологияда рецептор-субстратнинг ўзаро таъсирга асосланган янги биологик фаол бирикмаларни аниқлаш учун кенг қўлланилади. Бундан ташқари, усул бизга лиганд ёки комплекснинг макромолекула билан ўзаро таъсир механизмини ўрганишга ва оксилнинг фаол марказида лиганднинг қулай конформациясини топишга имкон беради. Шунини инобатга олган ҳолда биз 2-трифторацетилциклогексанон



бензоилгидразонининг *Fusarium* солани (PDB ID: 3QPC) замбуруғидан олинган оқсил билан CB-Dock2 онлайн сервери ёрдамида ўзаро таъсирини ўргандик [2].

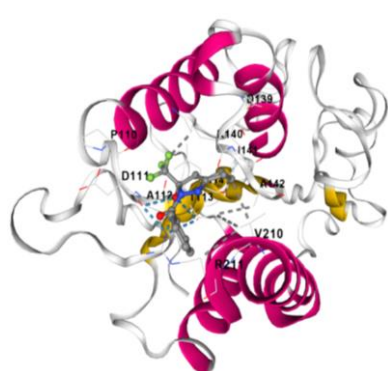
Ушбу онлайн серверда дастлаб оқсилнинг лиганд билан таъсирлашиш бўшлиқлари изланди, бунда 147, 143, 104, 100 ва 76 Å<sup>3</sup> ҳажмдаги 5 та фаол бўшлиқ маркази аниқланди (1-расм). Сўнг лиган ва оқсил серверга юклиниб, молекуляр докинги амалга оширилди.

Бўшлиқ рақами	Бўшлиқ ҳажми (Å <sup>3</sup> )	Марказ (x, y, z)	Бўшлиқ ўлчами (x, y, z)
<b>C1</b>	147	-4, -16, 12	14, 4, 6
<b>C2</b>	143	-6, -1, -10	9, 8, 4
<b>C3</b>	104	11, -4, 14	5, 10, 7
<b>C4</b>	100	1, -11, 21	8, 7, 5
<b>C5</b>	76	-15, -3, -5	6, 5, 4

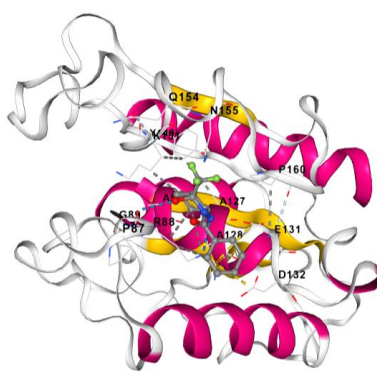


1-расм. Бўшлиқларни қидириш натижалари

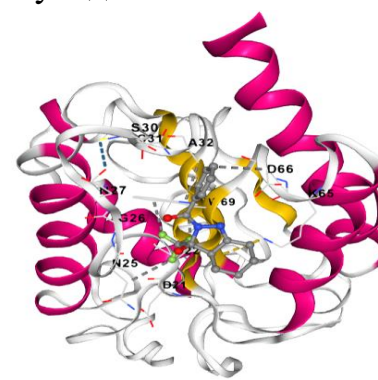
Оқсил ва лиганднинг ўзаро таъсиридан юқоридаги келтирилган бўшлиқларга мос равишда -6,5; -5,0; -5,9; -5,6 ва -6,0 kcal/mol энергияга эга фаоллик кузатилди (2-расм). Натижалар шуни кўрсатадики ҳажми энг катта ва энг кичик бўшлиқда лиганднинг фаоллиги юқори бўлади.



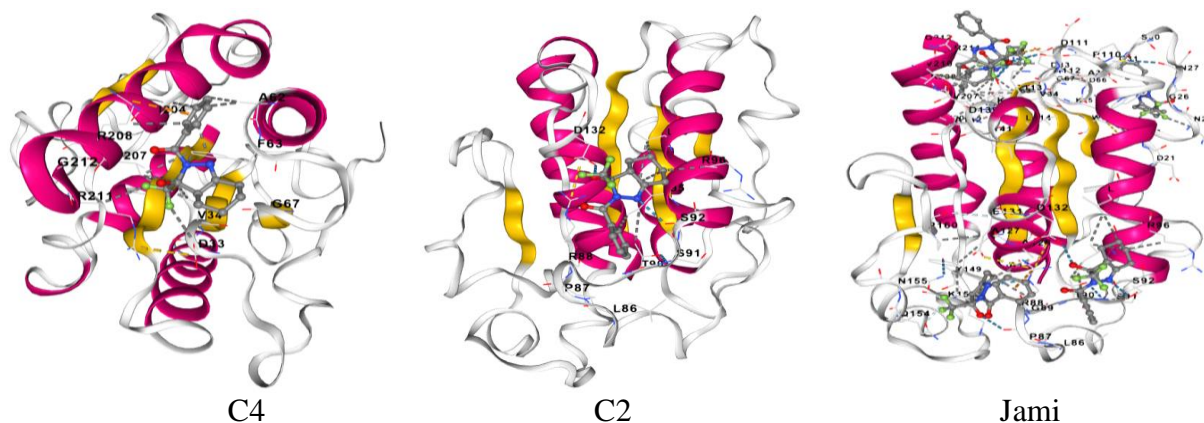
C1



C5



C3



**2-расм.** Оксилнинг изланган бўшлиқларига лиганднинг ўзаро таъсири

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

#### Фойдаланилган 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.
3. <https://youtu.be/DdMElO1J7lQ>

## BIS-KARBAMATLARNING *IN SILICO* BIOLOGIK HOSSALARINI O'RGANISH

**B.F.Muhiddinov, A.G.Maxsumov, N.A.Igamkulova, E.E.Mashayev,  
F.U.Shapatov**

*Toshkent kimyo-texnologiya instituti, Toshkent shahri*

Biz tomonimizdan krezollar va diizotsianatlar asosida sintez qilingan N,N'-geksametilen bis-[(o-krezolilo)-karbamat] ya'ni MEE-1 moddasining *In silico* biologik hossalarni o'rganib, kelajakda qo'llanilishi mumkin bo'lgan sohalarni aniqlash maqsad qilib olindi [1]. *In silico* - bu eksperimentni kompyuterda modellashtirish (simulyatsiya) ni bildiruvchi atama va u ko'pincha biologik faolliklarini o'rganadi. Yangi moddalardan amaliy foydalanish mumkin bo'lgan yo'nalishlarini topish uchun strukturaviy formulalarini "Tuzilish-faoliyat" (SAR) munosabatlariga asoslangan PASS Online kompyuterda bashorat qilish dasturi yordamida virtual skrining o'tkazildi va 3500 dan ortiq turlarini, jumladan farmakoterapevtik ta'sirlar, biokimyoviy mexanizmlar, toksiklik, metabolizm, gen ekspressiyasini rostlovchi, tashuvchilar bilan bog'liq faoliyatlar va boshqa extimoliy faolliklar 95% aniqlikda o'rganiladi (1-rasm).

<b>СЕРТИФИКАТЛАШ</b>		
1	<b>ПРИРОДНАЯ АМИНОКИЛОТА - МЕТИОНИН И ЕЁ КОМПЛЕКСООБРАЗУЮЩАЯ СПОСОБНОСТЬ</b> Рахимова М., Файзуллозода Э.Ф., Маджидов И.А., Мираминзода Ф	38
2	<b>ПРИМЕНЕНИЕ АЛКОКСИПЕРОКСИДОВ В СИНТЕЗЕ <math>\omega</math>-ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ СЛОЖНЫХ ЭФИРОВ</b> Д.И. Фоменков, Р.А. Будехин, И.А. Ярёмченко, А.О. Терентьев	40
3	<b>ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КРАТНОЙ СВЯЗИ УГЛЕРОД-АЗОТ В СИНТЕЗЕ ГИДРОПЕРОКСИДОВ</b> Р.А. Будехин, Д.И. Фоменков, И.А. Ярёмченко, А.О. Терентьев	41
4	<b>SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURAL ANALYSIS OF METHYLENE-GROUP BRIDGED BIS-AMINONITRILES</b> Abduakhad Kodirov, Burkhon Elmurov, Gerald Dräger, Holger Butenschön	42
5	<b>ИЗОЛЕЙЦИН И ЕЁ КОМПЛЕКСООБРАЗУЮЩАЯ СПОСОБНОСТЬ С Zn(II) В ФИЗИОЛОГИЧЕСКОМ РАСТВОРЕ</b> Давлатшоева Дж.А., Бобоев М.У., Эшова Г.Б.	44
6	<b>ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИОННЫХ ВОЗМОЖНОСТЕЙ БЕНЗО-1,4-ДИОКСАНА</b> <i>Турдиалиев М.З., Абдуллаев Т.Х., Пулатов Э.Х.</i>	47
7	<b>TIF TN BO'YICHA KREZOLLAR ASOSIDAGI BIS-KARBAMATLAR SINTEZI UCHUN XOMASHYOLAR TASNIFI</b> E.E.Mashayev, A.G.Maxsumov, M.G.Xamroqulov, H.N.Rahimov, O'.R.Azamatov	49
8	<b>MIKROTO'LQINLI PECH YORDAMIDA N-(4-METOKSIFENIL)PIKOLIN-2-KARBOKSAMID SINTEZI</b> Bo'riyeva Dilnoza Madarttovna, Abdushukurov Anvar Kabirovich, Yusupov Muxridin, Nurmatov Doston	51
9	<b>KARBAMATLAR VA BIS-KARBAMATLAR SINTEZI USULLARINI KLASSIFIKATSIYALASH</b> B.F.Muhiddinov, A.G.Maxsumov, H.Sh.Bo'tayev, E.E.Mashayev, O.O.Qodirov	53
10	<b>СИНТЕЗ АВИАЦИОННОГО ТОПЛИВА И МОНОМЕРОВ КАУЧУКА КОНВЕРСИЕЙ НИЗШИХ СПИРТОВ</b> Илолов А.М.	54
11	<b>ВЛИЯНИЕ БИОМОДИФИЦИРОВАННЫХ ФОСФОРНЫХ УДОБРЕНИЙ НА КИСЛОТНОСТЬ СРЕДЫ.</b> Ш.У. Йулдошев	56
12	<b>ИЗУЧЕНИЕ РЕАКЦИИ КОНДЕНСАЦИИ С<sub>6</sub>О-ПРОИЗВОДНЫХ АРОМАТИЧЕСКИХ АМИНОКИСЛОТ С ЭПИХЛОРОГИДРИНОМ</b> Икромов М.С., Аловиддинзода Р.А., Кабирзода З.О., Раджабзода С.И.	57
13	<b>КОНДЕНСАЦИЯ 1-ХЛОПРОПАН-2,3-ДИОЛА С С<sub>6</sub>О-ПРОИЗВОДНЫМИ АМИНОКИСЛОТ АРОМАТИЧЕСКОГО РЯДА</b> Икромов М.С., Аловиддинзода Р.А., Кабирзода З.О., Раджабзода С.И.	60
14	<b>PASS ONLINE, СВ-DOCK2, ARGUSLAB ДАСТУРЛАРИДА 2-ТРИФТОРАЦЕТИЛЦИКЛОГЕКСАНОН БЕНЗОИЛГИДРАЗОНИНГ АНАЛИЗИ ВА МОЛЕКУЛЯР ДОКИНГИ</b> Қ.Ф. Авезов, Б.Б. Умаров, Б.Ш. Ганиев, Г.Қ. Холиқова	62
15	<b>BIS-KARBAMATLARNING IN SILICO BIOLOGIK HOSSALARINI O'RGANISH</b> B.F.Muhiddinov, A.G.Maxsumov, N.A.Igamkulova, E.E.Mashayev, F.U.Shapatov	64