

**SIANUR KISLOTANING MOCHEVINA ALMASHINGAN HOSILALARINING ONLINE  
MOLEKULYAR DOKINGI VA PASS ANALIZI**  
**ONLINE МОЛЕКУЛЯРНЫЙ СТЫКОВКА И PASS АНАЛИЗ МОЧЕВИНО  
ЗАМЕЩЕННЫХ ПРОДУКТОВ ЦИАНУРОВОЙ КИСЛОТЫ**  
**ONLINE MOLECULAR DOCKING AND PASS ANALYSIS OF UREA SUBSTITUTED  
CYANURIC ACID PRODUCTS**

*Hasan Tilloyevich Avezov, Buxoro davlat universiteti  
Organik va fizkolloid kimyo kafedrasida dotsenti, kimyo fanlari nomzodi*  
*Baxtiyor Shukurulloevich Ganiyev, Buxoro davlat universiteti  
Organik va fizkolloid kimyo kafedrasida tayanch doktranti*  
*Gulyayra Qo`ldosheva Xoliqova, Buxoro davlat universiteti  
Organik va fizkolloid kimyo kafedrasida assistenti*  
*Furqat G'ayrat o'g'li Salimov, Buxoro davlat universiteti  
Organik va fizkolloid kimyo kafedrasida magistranti*  
*Ferangiz Sadilloevna Aslonova, Buxoro davlat universiteti  
Organik va fizkolloid kimyo kafedrasida talabasi*

DOI: <https://doi.org/10.55475/jcgtm/vol1.iss3.2022.53>

**Annotatsiya:** Ushbu maqolada CB-Dock va PASS onlayn prognozli dasturiy ta'minotidan foydalangan holda sianur kislotaning mochevina almashingan hosilalari molekulyar doking natijalari, shuningdek, biologik faollik nuqtai nazaridan ularni qo'llashning mumkin bo'lgan sohalari haqida ma'lumotlar keltirilgan.

**Аннотация:** В данной работе приведены результаты молекулярного докинга мочевино замещенных продуктов циануровой кислоты с применением онлайн прогнозирующей программы CB-Dock и PASS, а так же сведения об возможных областях их применения по биологической активности.

**Abstract:** This paper presents the results of molecular docking of urea-substituted cyanuric acid products using the online predictive program CB-Dock and PASS, as well as information about possible areas of their application by biological activity.

**Kalit so'zlar:** CB-Dock, PASS, biologik faollik, siyanur kislota, oqsil-ligand dokingi.

**Ключевые слова:** CB-Dock, PASS, биологические активности, циануровая кислота, стыковка белок-лиганд.

**Keywords:** CB-Dock, PASS, biological activities, cyanuric acid, protein-ligand docking.

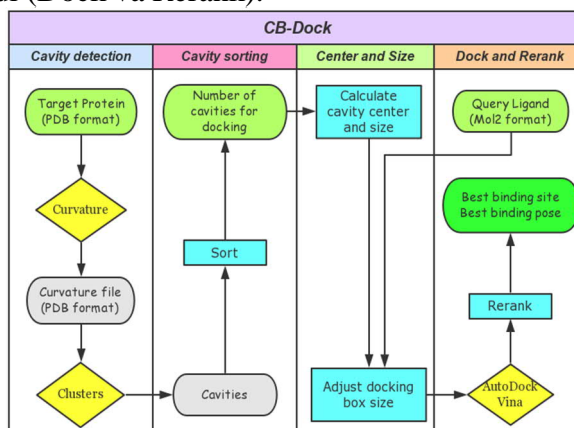


**Raxmadiyeva Sluken Begalievnaning muborak xotirasiga bag'ishlayman. U menga xalqaro tajriba bilan ishlashni o'rgatdi. U menga jahon tajribasini chuqur o'rganishimni, kimyo fanini ingliz tili bilan o'zlashtirishimni aytgan. S. B. Raxmadiyevani Alloh rahmatiga olsin. Omin.**

### **I. Kirish.**

Oldinroq biz sianur kislotaning mochevina almashingan hosilalarining sintez metodikasi, kvant kimyoviy hisoblashlari va IQ spektroskopiyasi haqida nashr etgan edik[1-3]. Ushbu ishda biz hosilalarning CB-Dock va PASS kabi kompyuter dasturlarida biologik faolligi natijalari haqida to'xtalib o'tamiz.

CB-Dock oqsil molekulasining butun bir yuzasi emas, balki uning ko'rsatib o'tilgan joylarini bevosita doking qilish uchun ishlab chiqarilgan. Shuning uchun birinchi navbatda taklif etilayotgan bog'lanish sohaslarini aniqlab olish kerak (bo'shliqlarni aniqlash). Odatda sohadagi ligandlarning bog'lanishi o'zida katta bo'shliqni namoyon etadi, shuning uchun biz bir necha yuqori sohadagi bo'shliqlarni keyingi analiz uchun mos o'lchamdagi bo'shliqni tanlab olamiz (bo'shliqlarni saralash). So'ngra birikish markazini hisoblaymiz va tutashish qutisi o'lchamiga mos shaklda to'g'rilaymiz. Ushbu parametrlar AutoDock Vina orqali molekullarni uchma-uch biriktirish uchun kerak bo'ladi (Markaz va O'lcham). Biriktirish jarayoni tugaganidan so'ng, tutashgan pozalar reytingiga ko'ra tartiblanadi (Dock va Rerank).



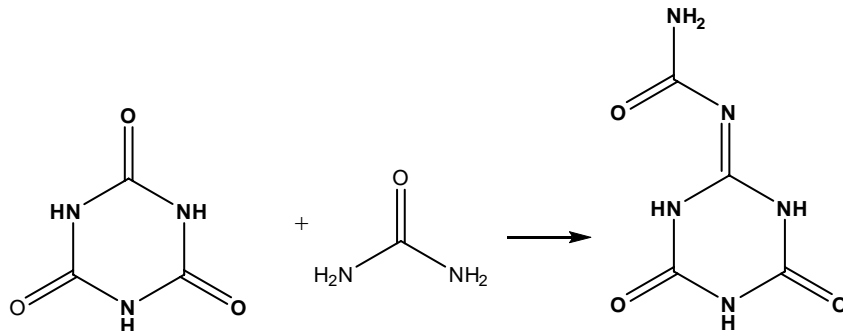
**1-rasm. Ligandlarning molekulyar biriktirilishini amalga oshiradigan onlayn CB-Dock dasturining ish jarayoni**

Oqsil-ligand birikmasi bog'lanish va ligandlarga o'xshashligini oldindan bilish uchun katta miqyosda foydalaniladi. Oqsil-ligand birikmasi (CADD) kompyuterda dori-darmon qidirishda kuchli vosita hisoblanadi. Hozirgi kunda oqsil-ligandlarni ulash o'nlab tijoratlashtirilgan va akademik vositalari mavjud [3-7]. Ko'pgina biriktiruvchi vositalar ligandning bog'lanish sohasi (ushbu sohadagi ligandning aylanishi va uzatilishi) uchun energetik holat nuqtai nazardan oldindan yaxshiroq izlash uchun talab etiladi. Bog'lanish sohasi odatda kubik blok shaklida ko'rsatiladi, shuning uchun uning o'lchami va markazi konfarmatsion tanlovlar uchun bo'shliqning chegaralarini aniqlab, aniq docking qilishda hal qiluvchi ahamiyat kasb etadi. Dasturning ko'plab maqolalarida bog'lanish sohaslari keltirilmagan. Berilgan ligand va oqsilning orasida potensial ta'sirlashuvni aniqlash uchun, eng mumkin bo'lgan bog'lanish sohasini toppish va oqsilning butun yuzasi bo'ylab docking qilish kerak bo'ladi. Ushbu jarayon bevosita doking deb ataladi [4, 7]. Oddiy dokingni bevosita docking bilan taqqoslaganda, bevosita doking jarayoni ishonchli va barqaror emas, chunki doking uchun olingan namuna odatda, ma'lum bir sonli tasodifiy qidiruvlar uchun kattalik qiladi. Ammo bevosita doking jarayoni ayniqsa noma'lum bog'lanish holatlarida yuzaga kelishi mumkin bo'lgan o'zaro ta'sirlarni aniqlash uchun qimmatli baholanadi [7].

## II. Eksperimental qism.

### *Sianur kislotaning mono-mochevina almashingan birikmasi sintezi.*

Sianur kislotaning 0,001 mol (0,129 g) 50 ml suvdagi suspenziyasiga 0,001 mol (0,06 g) mochevina qo'shildi. Reaksiyon aralashmani qaytarma sovutgich ulangan kolbada bir soat davomida qaynatildi. Reaksiyon aralashmani 2 sutka xona haroratida qoldirildi. Ikki kundan so'ng cho'kmaga tushgan kristallarni filtrlandi, oz miqdordagi metanolda, keyin esa atseton va geksanda yuvildi. Metanolda qayta kristallangan 0,15876 g (84 %) 1-(4,6-diokso-1,3,5-triazinan-2-iliden) mochevina (L1) mahsulot o'lchab olindi va suyuqlanish harorati aniqlandi (T.suyuq. 252°C).



Xuddi shu tartibda sianur kislotaning di-, tri- mochevina hosilalari sintez qilib olindi.

### III. Natijalar va ularning muhokamasi.

Berilgan ligand va oqsil o'rtasidagi bog'lanishni aniqlash uchun oqsilning butun yuzasi bo'ylab doking qilish kerak bo'ladi va bu esa bog'lanish ehtimoli yuqori bo'lgan sohani toppish usuli hisoblanadi. Bu jarayon esa bevosita doking jarayoni deb ataladi [4,8,10]. Oddiy dokingga qaraganda bevosita doking jarayoni ishonchli va barqaror emas, chunki doking uchun olingan namuna odatda, ma'lum bir sonli tasodifiy qidiruvlar uchun kattalik qiladi. Ammo bevosita doking jarayoni ayniqsa noma'lum bog'lanish holatlarida yuzaga kelishi mumkin bo'lgan o'zaro ta'sirlarni aniqlash uchun qimmatli baholanadi [9,11].

Dokingni qayta ishlash jarayonida ishning holatini ko'rsatadigan indikator paydo bo'ladi. Jarayon tugaganda (taxminan 3 daqiqadan so'ng), web sahifa natijalar bilan yangilanadi. 1-jadvalda Vina ballari, bo'shliqlar o'lchami, doking markazlari va taklif etiladigan bo'shliqlardagi o'lchamlar keltirilgan.

1-jadval

#### Doking jarayonidan keying natijalar

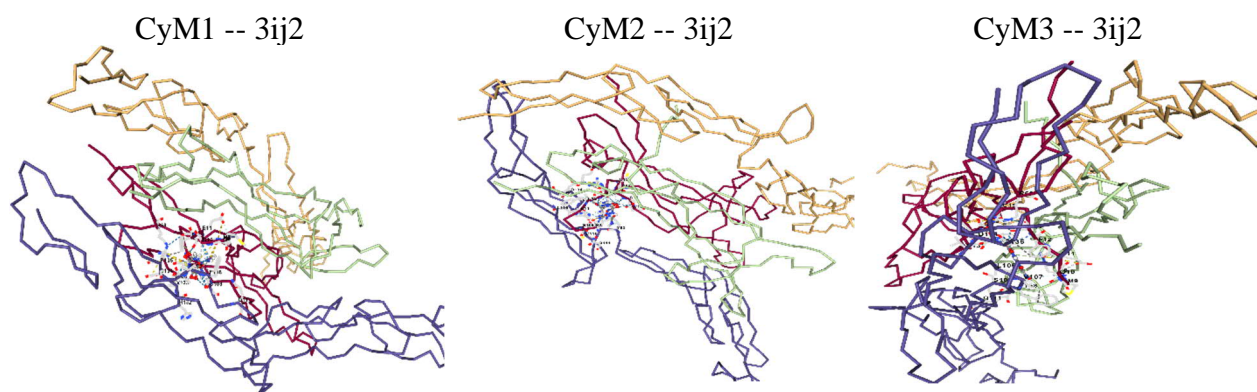
CyM1 -- 3ij2

Vina score	Cavity size	Center			Size		
		x	y	z	x	y	z
-12.4	2493	-10	62	1	25	31	17
-11.1	2380	4	68	28	26	28	17
-11.1	1081	-19	85	9	23	17	17
-10.8	1105	-6	67	14	28	23	17
-9.8	1206	8	47	13	17	17	25

CyM2 -- 3ij2

Vina score	Cavity size	Center			Size		
		x	y	z	x	y	z
-10	2493	-10	62	1	25	31	18
-9.7	2380	4	68	28	26	28	18
-9.4	1081	-19	85	9	18	18	18
-8.9	1105	-6	67	14	28	18	18
-7.9	1206	8	47	13	18	18	25

Jadvalda ligandni tanlagandan so'ng, struktura interaktiv 3D grafikalarda tasvirlanadi(2-rasm).



**2-rasm. Sianur kislotaning mochevina almashingan hosilasining molekulyar dokingidan keying strukturasi.**

Bizning misolimizda, CyM1 ligand uchun Vina balli bilan yuqori bog'lanish holati -12,4 ni tashkil qiladi, ammo barcha ligandlar bir-biriga teng bo'lgan bog'lanish bo'shliqlariga ega (2493). CyM2 ligandlari uchun esa Vina balli -10 va CyM3 uchun Vina balli -8,5 ga teng.

**Jadval 1**

**CyM1-CyM3 ligandlari uchun bo'shliq o'lchamlari va vina ballarining qiymatlari**

CyM1		CyM2		CyM3	
Vina score	Cavity size	Vina score	Cavity size	Vina score	Cavity size
-12.4	2493	-10	2493	-8.5	2493
-11.1	2380	-9.7	2380	-7.9	1105
-11.1	1081	-9.4	1081	-7.8	2380
-10.8	1105	-8.9	1105	-7.7	1206
-9.8	1206	-7.9	1206	-7.6	1081

№	Biologik faolligi	Faollik/ nafaollik	Sianur kislotaning mochevina almashingan hosilalari		
			CyM1	CyM2	CyM3
1	Leykopoez stimulyatori [12]	P <sub>a</sub>	0,683	0,683	0,660
		P <sub>i</sub>	0,008	0,008	0,010
2	NADPH-peroksidaza ingibitori [13]	P <sub>a</sub>	0,696	0,696	0,793
		P <sub>i</sub>	0,028	0,028	0,013
3	Pterindeaminaz ingibitori [14]	P <sub>a</sub>	0,858	0,858	0,843
		P <sub>i</sub>	0,003	0,003	0,003
4	Dimetilargininaz ingibitori	P <sub>a</sub>	0,749	0,749	0,825
		P <sub>i</sub>	0,010	0,010	0,005
5	Fobik kasalliklarni davolash	P <sub>a</sub>	0,714	0,714	0,806
		P <sub>i</sub>	0,070	0,070	0,032

#### IV. Xulosalar

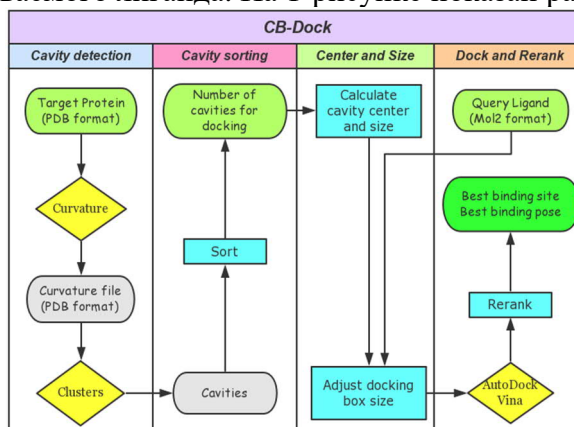
Biz tomondan hosil qilingan yangi birikmalar kvant-kimyoviy va fizik-kimyoviy usullar yordamida oldinroq o'rganilgan bo'lib, ushbu maqolada ularning biologik faolligi organildi. PASS onlayn dasturi yordamida biologik faollikni oldindan ko'rish natijalarini ilmiy nashrlarda eksperimental ravishda aniqlangan ma'lumotlar bilan taqqoslash orqali birikmalarning qo'shimcha biotibbiyot salohiyati to'g'risida xulosalar chiqarildi [12-14].

Ru

*Посвящая светлой памяти Рахмадиевой Слукен Бегалиевны. Она научила меня работать международным опытом. Она сказала мне углублённо изучить мировой опыт и освоить химию с английским языком. Да смилуется Аллах над С.Б.Рахмадиевой. Аминь.*

**I. Введение.** Ранее нами было опубликовано методика синтеза, кванто-химические расчеты и ИК-спектроскопия мочевино замещенной продукт циануровой кислоты [1-3]. В данной работе мы рассуждаем результаты прогноза онлайн программы CB-Dock и PASS биологические активность этих соединений.

CB-Dock был разработан для выполнения слепого докинга в предсказанных местах, а не на всей поверхности белка. Поэтому первым шагом является обнаружение предполагаемых сайтов связывания (**обнаружение полостей**). Поскольку сайты связывания лиганда обычно представляют собой более крупные полости, мы выбираем несколько верхних полостей в соответствии с размером полости для дальнейшего анализа (**сортировка полостей**). Затем мы вычисляем центр стыковки и корректируем размер стыковочной коробки. Эти параметры необходимы для стыковки молекул с помощью AutoDock Vina (**Центр и Размер**). После завершения процесса стыковки связанные позы ранжируются в соответствии с оценкой стыковки (**Dock and Rerank**). Первая конформация считается наилучшей позой связывания, а соответствующий сайт является оптимальным сайтом связывания для запрашиваемого лиганда. На 1-рисунке показан рабочий процесс CB-Dock.



**1-рис. Рабочий процесс онлайн программу CB-Dock, выполняющий молекулярный стыковку лигандов**

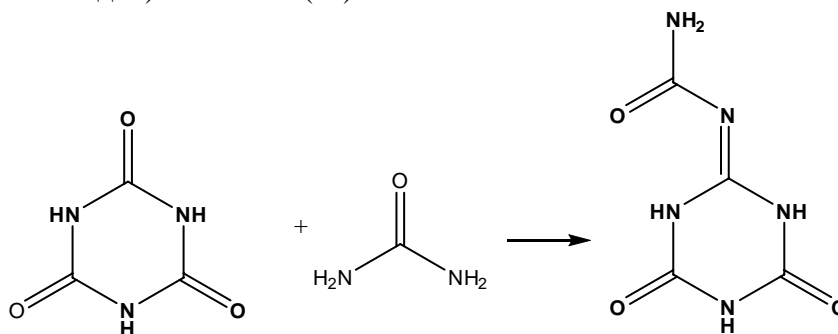
Стыковка белок-лиганд широко используется для предсказания способов связывания и средства лигандов. Стыковка белок-лиганд является мощным инструментом для компьютерного поиска лекарств (CADD). В настоящее время существуют десятки коммерческих и академических инструментов для докинга белок-лиганд [3-7]. Большинству инструментов стыковки требуется область связывания лиганда (вращение и трансляция лиганда в этой области) заранее для поиска наиболее благоприятного с точки зрения энергии режима связывания. Область связывания обычно представлена в виде кубического блока, поэтому ее размер и центр имеют решающее значение для точной стыковки, поскольку они определяют границы пространства конформационной выборки. Во многих статьях

приложений области привязки неизвестны. Чтобы идентифицировать потенциальные взаимодействия между данным белком и лигандом, необходимо выполнить докинг на всей поверхности белка, чтобы найти наиболее вероятный способ связывания. Этот процесс называется слепым докингом [4, 7]. По сравнению с обычной стыковкой, слепая стыковка менее надежна и стабильна, поскольку пространство для стыковки обычно слишком велико для достаточной выборки с использованием ограниченного числа случайных поисков. Тем не менее слепой докинг особенно ценен для обнаружения неожиданных взаимодействий, которые могут происходить в неидентифицированных режимах связывания [7].

## II. Экспериментальная часть

### Синтез моно-мочевино замещенной продукт циануровой кислоты.

К суспензии 0,001 моль (0,129 г) циануровой кислоты в 50 мл воде добавили 0,001 моль (0,06 г) мочевины. Реакционную смесь кипятили в течение одного часа. Реакционную смесь оставили в течение 2 суток при комнатной температуре. Через 2 суток выпавшие кристаллы отфильтровывали, промывали небольшим количеством метанола, ацетона и гексаном. После перекристаллизации из метанола получили 0,15876 г (84 %) 1-(4,6-диоксо-1,3,5-триазинан-2-илиден) мочевины ( $L^1$ ) с Т. плав. 252°C.



Аналогично синтезированы ди-, три- мочевино замещенных продуктов циануровой кислоты.

## III. Результаты и их обсуждение

Чтобы идентифицировать потенциальные взаимодействия между данным белком и лигандом, необходимо выполнить докинг на всей поверхности белка, чтобы найти наиболее вероятный способ связывания. Этот процесс называется слепым докингом [4,8,10]. По сравнению с обычной стыковкой, слепая стыковка менее надежна и стабильна, поскольку пространство для стыковки обычно слишком велико для достаточной выборки с использованием ограниченного числа случайных поисков. Тем не менее слепой докинг особенно ценен для обнаружения неожиданных взаимодействий, которые могут происходить в неидентифицированных режимах связывания [9,11].

Во время обработки стыковки появлялся индикатор выполнения, показывающий состояние задания. Когда обработка была завершена (примерно через 3 минуты), веб-страница была обновлена с результатами. В таблице 1 перечислены баллы Vina, размеры полостей, центры стыковки и размеры предполагаемых полостей.

Таблица 1

### Результаты после завершения стыковки

CyM1 -- 3ij2

Vina score	Cavity size	Center			Size		
		x	y	z	x	y	z

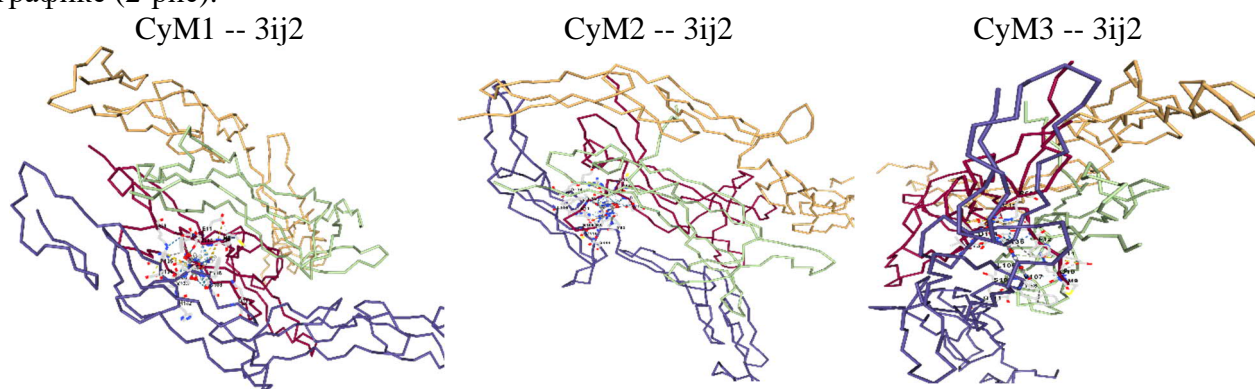
CyM2 -- 3ij2

Vina score	Cavity size	Center			Size		
		x	y	z	x	y	z

-12.4	2493	-10	62	1	25	31	17
-11.1	2380	4	68	28	26	28	17
-11.1	1081	-19	85	9	23	17	17
-10.8	1105	-6	67	14	28	23	17
-9.8	1206	8	47	13	17	17	25

-10	2493	-10	62	1	25	31	18
-9.7	2380	4	68	28	26	28	18
-9.4	1081	-19	85	9	18	18	18
-8.9	1105	-6	67	14	28	18	18
-7.9	1206	8	47	13	18	18	25

После выбора лиганда в таблице структура визуализируется в интерактивной 3D-графике (2-рис).



**2-рис. Структура после молекулярной докинга мочевино замещенных продуктов циануровой кислоты и**

В нашем примере верхний способ связывания с оценкой Vina для лиганда CyM1 - 12,4, но у всех лигандов полость связывания равна к друг другу (2493). А для лигандов CyM2 баллы Vina равно -10 и CyM3 баллы Vina равно -8,5.

**Таблица 1**

**Значение размеры полостей и баллы Vina для лигандов CyM1- CyM3**

CyM1		CyM2		CyM3	
Vina score	Cavity size	Vina score	Cavity size	Vina score	Cavity size
-12.4	2493	-10	2493	-8.5	2493
-11.1	2380	-9.7	2380	-7.9	1105
-11.1	1081	-9.4	1081	-7.8	2380
-10.8	1105	-8.9	1105	-7.7	1206
-9.8	1206	-7.9	1206	-7.6	1081

№	Биологические активность	Активность/ Неактивность	Мочевино замещенных продуктов циануровой кислоты		
			CyM1	CyM2	CyM3
1	Стимулятор лейкопозза [12]	P <sub>a</sub>	0,683	0,683	0,660
		P <sub>i</sub>	0,008	0,008	0,010
2		P <sub>a</sub>	0,696	0,696	0,793

	Ингибитор NADPH-пероксидазы [13]	$P_i$	0,028	0,028	0,013
3	Ингибитор птериндезаминазы [14]	$P_a$	0,858	0,858	0,843
		$P_i$	0,003	0,003	0,003
4	Ингибитор диметиларгининазы	$P_a$	0,749	0,749	0,825
		$P_i$	0,010	0,010	0,005
5	Лечение фобических расстройств	$P_a$	0,714	0,714	0,806
		$P_i$	0,070	0,070	0,032

#### IV. Выводы

Нами ранее были изучены полученных новых соединений квантово-химическими и физико-химическими методами [1-3], в данной статье изучено их биологические свойства. С помощью онлайн программе PASS сделали выводы о дополнительном медико-биологическом потенциале соединений путем сравнения результатов прогнозов биоактивности с данными, определенными экспериментально в научных публикациях [12-14].

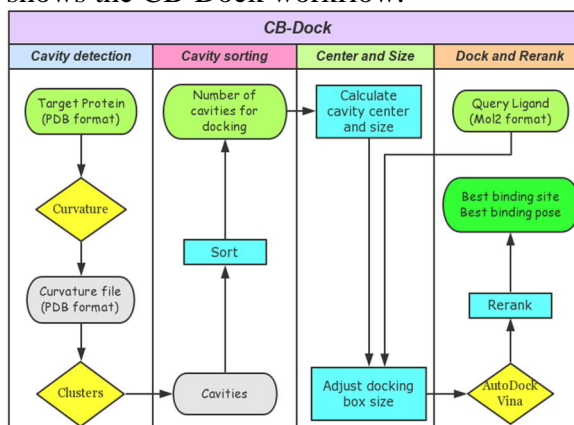
En

*I dedicate to the bright memory of Rakhmadieva Sluken Begalievna. She taught me how to work with international experience. May Allah have mercy on S.B. Rakhmadieva. Amen.*

#### I. Introduction

Previously, we published a synthesis technique, quantum chemical calculations and IR spectroscopy of a urea-substituted cyanuric acid product [1-3]. In this paper, we discuss the results of the prediction of the CB-Dock and PASS online programs, the biological activity of these compounds.

CB-Dock was designed to perform blind docking at predicted locations, rather than on the entire surface of the protein. Therefore, the first step is to detect the intended binding sites (cavity detection). Since ligand binding sites are usually larger cavities, we select several upper cavities according to the size of the cavity for further analysis (cavity sorting). Then we calculate the docking center and adjust the size of the docking box. These parameters are necessary for joining molecules using AutoDock Vina (Center and Size). After the docking process is completed, the associated poses are ranked according to the docking score (Dock and Rerank). The first conformation is considered the best binding position, and the corresponding site is the optimal binding site for the requested ligand. Figure 1 shows the CB-Dock workflow.





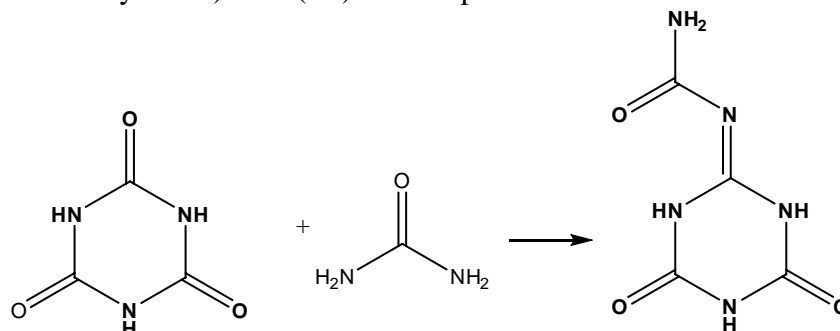
**Fig.1. Workflow online CB-Dock program performing molecular ligand docking**

Protein-ligand coupling is widely used to predict ligand binding and affinity. Protein-ligand docking is a powerful tool for computer-assisted drug discovery (CADD). Currently, there are dozens of commercial and academic tools for protein-ligand docking [3-7]. Most docking tools require a ligand binding region (rotation and translation of the ligand in this region) in advance to find the most favorable binding mode in terms of energy. The binding region is usually represented as a cubic block, so its size and center are crucial for accurate docking, since they define the boundaries of the conformational sampling space. In many application articles, the binding areas are unknown. In order to identify potential interactions between a given protein and a ligand, it is necessary to perform docking on the entire surface of the protein in order to find the most likely binding method. This process is called blind docking [4, 7]. Compared to conventional docking, blind docking is less reliable and stable because the docking space is usually too large for sufficient sampling using a limited number of random searches. Nevertheless, blind docking is especially valuable for detecting unexpected interactions that may occur in unidentified binding modes [7].

**II. The experimental part**

**Synthesis of mono-urea substituted cyanuric acid product.**

0.001 mol (0.129 g) of cyanuric acid was added to a suspension of 0.001 mol (0.129 g) of urea in 50 ml of water. The reaction mixture was boiled for one hour. The reaction mixture was left for 2 days at room temperature. After 2 days, the fallen crystals were filtered out, washed with a small amount of methanol, acetone and hexane. After recrystallization, 0.15876 g (84%) of 1-(4,6-dioxo-1,3,5-triazinane-2-ylidene) urea (L1) with T. plav was obtained from methanol. 252oC.



Similarly, di-, tri-urea substituted cyanuric acid products were synthesized.

**III. Results and discussion**

In order to identify potential interactions between a given protein and a ligand, it is necessary to perform docking on the entire surface of the protein in order to find the most likely binding method. This process is called blind docking [4,8,10]. Compared to conventional docking, blind docking is less reliable and stable because the docking space is usually too large for sufficient sampling using a limited number of random searches. Nevertheless, blind docking is especially valuable for detecting unexpected interactions that may occur in unidentified binding modes [9,11]. During the docking processing, a progress bar appeared showing the status of the task. When the processing was completed (after about 3 minutes), the web page was updated with the results. Table 1 lists the Vina scores, the dimensions of the cavities, the docking centers and the dimensions of the intended cavities.

**Table 1**

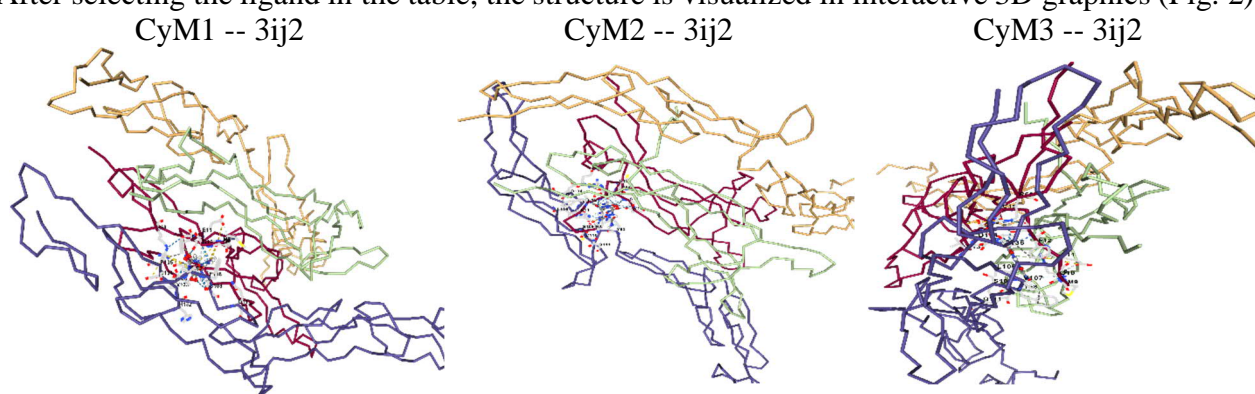
**Results after the docking is completed**

CyM1 -- 3ij2				CyM2 -- 3ij2			
		Center	Size			Center	Size

Vina score	Cavity size	x	y	z	x	y	z
-12.4	2493	-10	62	1	25	31	17
-11.1	2380	4	68	28	26	28	17
-11.1	1081	-19	85	9	23	17	17
-10.8	1105	-6	67	14	28	23	17
-9.8	1206	8	47	13	17	17	25

Vina score	Cavity size	x	y	z	x	y	z
-10	2493	-10	62	1	25	31	18
-9.7	2380	4	68	28	26	28	18
-9.4	1081	-19	85	9	18	18	18
-8.9	1105	-6	67	14	28	18	18
-7.9	1206	8	47	13	18	18	25

After selecting the ligand in the table, the structure is visualized in interactive 3D graphics (Fig. 2).



**Fig.2. Structure after molecular docking of urea substituted cyanuric acid products**

In our example, the upper binding method with a Vina score for the CyM1 ligand is -12.4, but all ligands have a binding cavity equal to each other (2493). And for CyM2 ligands, Vina scores are -10 and CyM3 Vina scores are -8.5.

**Table 1**

**The value of cavity sizes and Vina scores for CyM1- CyM3 ligands**

CyM1		CyM2		CyM3	
Vina score	Cavity size	Vina score	Cavity size	Vina score	Cavity size
-12.4	2493	-10	2493	-8.5	2493
-11.1	2380	-9.7	2380	-7.9	1105
-11.1	1081	-9.4	1081	-7.8	2380
-10.8	1105	-8.9	1105	-7.7	1206
-9.8	1206	-7.9	1206	-7.6	1081

№	Biological activity	Activity/ Inactivity	Urea Substituted Cyanuric acid products		
			CyM1	CyM2	CyM3
1	Leukopoiesis stimulator [12]	P <sub>a</sub>	0,683	0,683	0,660
		P <sub>1</sub>	0,008	0,008	0,010
2	NADPH peroxidase inhibitor [13]	P <sub>a</sub>	0,696	0,696	0,793

		P <sub>i</sub>	0,028	0,028	0,013
3	Pterine deaminase inhibitor [14]	P <sub>a</sub>	0,858	0,858	0,843
		P <sub>i</sub>	0,003	0,003	0,003
4	Dimethylarginine inhibitor	P <sub>a</sub>	0,749	0,749	0,825
		P <sub>i</sub>	0,010	0,010	0,005
5	Treatment of phobic disorders	P <sub>a</sub>	0,714	0,714	0,806
		P <sub>i</sub>	0,070	0,070	0,032

#### IV. Conclusion

We have previously studied the obtained new compounds by quantum chemical and physico-chemical methods [1-3], in this article their biological properties are studied. Using the PASS online program, conclusions were drawn about the additional biomedical potential of compounds by comparing the results of bioactivity predictions with data determined experimentally in scientific publications [12-14].

#### References

1. Ganiev B.Sh., Aslonova F.S., Mardonov U.M., Ashurov J.M.. Synthesis and IR-spectroscopy of cyanuric acid urea and thiourea exchange products. 1st Uzbekistan-Japan International Symposium on Green Chemistry and Sustainable Development, Tashkent. November 29-30, 2021. P. 51
2. Ганиев Б.Ш., Мардонов У.М., Ашуров Ж.М., Холикова Г.К., Музафаров Ф.И.. Изучение координационных свойств мочевины замещенных продуктов циануровой кислоты. Материалы Республиканской научно-практической конференции «Актуальные проблемы химии комплексных соединений», посвященной 90-летию Парпиева Нусрата Агзамовича. Ташкент. - НУУ. - 2021 г. 14-15 сентября. - С. 37-38
3. Ганиев Б.Ш., Мардонов У.М., Ашуров Ж.М., Холикова Г.К., Музафаров Ф.И.. Гранулярные молекулярные орбитали и дескрипторы глобальной реакционной способности триазиновых соединений. Материалы Республиканской научно-практической конференции «Актуальные проблемы химии комплексных соединений», посвященной 90-летию Парпиева Нусрата Агзамовича. Ташкент. - НУУ. - 2021 г. 14-15 сентября. - С. 35-36
4. <http://clab.labshare.cn/cb-dock/php/index.php>
5. <https://www.rcsb.org/>
6. Feng, D., Kim, T., Özkan, E., Light, M., Torkin, R., Teng, K. K., ... & Garcia, K. C. (2010). Molecular and structural insight into proNGF engagement of p75NTR and sortilin. *Journal of molecular biology*, 396(4), 967-984.
7. Liu, Y., Grimm, M., Dai, W. T., Hou, M. C., Xiao, Z. X., & Cao, Y. (2020). CB-Dock: a web server for cavity detection-guided protein–ligand blind docking. *Acta Pharmacologica Sinica*, 41(1), 138-144.
8. Iorga B, Herlem D, Barré E, Guillou C. Acetylcholine nicotinic receptors: finding the putative binding site of allosteric modulators using the “blind docking” approach. *J Mol Model*. 2006;12:366–72
9. Yuriev E, Holien J, Ramsland PA. Improvements, trends, and new ideas in molecular docking: 2012–2013 in review. *J Mol Recognit*. 2015;28:581–604.
10. Meiler J, Baker D. ROSETTALIGAND: protein-small molecule docking with full sidechain flexibility. *Proteins*. 2006;65:538–48.

11. Marialke J, Tietze S, Apostolakis J. Similarity based docking. J Chem Inf Model. 2008;48:186–96.
12. Харитонов, Л. В., et al. "Влияние дипептида тимогена и его сочетания со стимулятором лейкопоза на всасывание иммуноглобулинов у новорожденных телят." Ветеринарный врач 5 (2014): 33-39.
13. Величко, А. К., В. Б. Соловьев, and М. Т. Генгин. "Методы лабораторного определения общей перекись разрушающей активности ферментов растений" Известия Пензенского государственного педагогического университета им. ВГ Белинского 18 (2009): 44-48.
14. Volkova, Darya S., et al. "Substituted 4-nitrosopyrazoles in the diels-alder reaction." Siberian Journal of Life Sciences and Agriculture 13.5 (2021): 104-119.

### ***Author Biographies***

***Hasan T. Avezov, Bukhara State University***

*Associate Professor of Organic and Physicolloid Chemistry, PhD in Chemistry*

***Bakhtiyor Sh. Ganiyev, Bukhara State University***

*Basic doctoral student of the Department of Organic and Physicolloid Chemistry*

***Gulyayra K. Kholikova, Bukhara State University***

*Assistant of the Department of Organic and Physicolloid Chemistry*

***Furkat G. Salimov, Bukhara State University***

*Master of the Department of Organic and Physicolloid Chemistry*

***Ferangiz S. Aslonova, Bukhara State University***

*Student of the Department of Organic and Physicolloid Chemistry*