Abdukarimov.A.Sh.

Mirzo Ulug'bek nomidagi O'zbekiston Milliy Universiteti 1-kurs magistranti

Okmanov R.

O'zbekiston Milliy Universiteti katta o'qituvchi, PhD

ALMASHINGAN 2-TIO-5-ARIL-1,3,4-OKSADIAZOL XOSILALARINING BIOLOGIK FAOLLIGINI PASS (ONLINE) DASTURIDA TEKSHIRISH

Annotatsiya : Hozirgi kunda yangi modda sintez qilish bilan birga uning biologik faolligini o'rganish ham davr talabi hisoblanadi. Ushbu ishimizda PASS (online) dasturida dietanolamin va uning ba'zi bir xosilalarining ayrim kasalliklarga qarshi biologik faolligini o'rganish natijasi keltirilgan.

Kalit so'zlar : Pa qiymat, Pi qiymat, PASS (online), biologik faollik, ingibitor, struktura-biologik faollik, dietanolamin

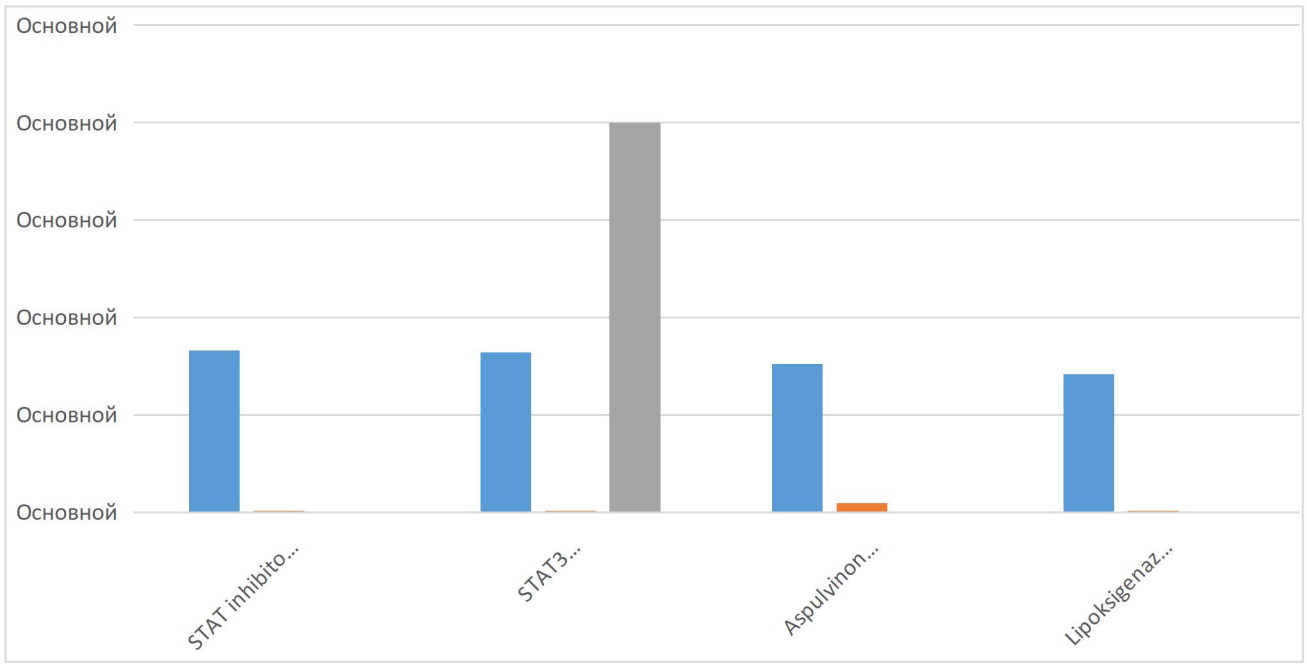
Kirish

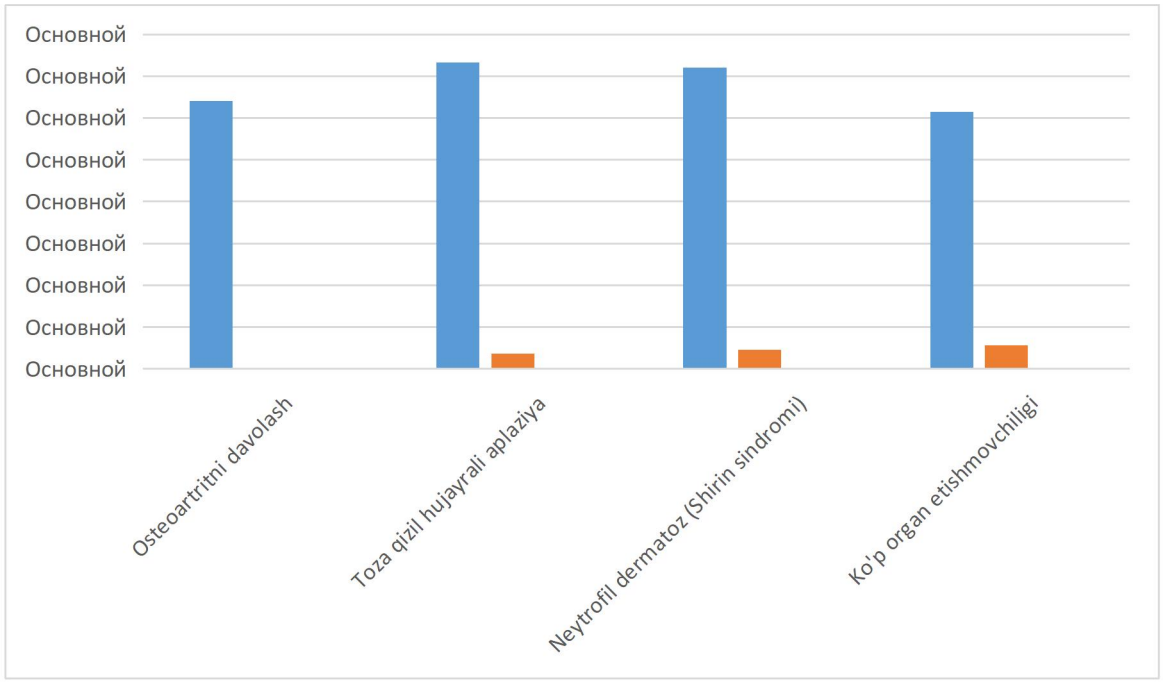
PASS online dasturida moddaning strukturasiga asosan biologik faolligini o'rganish mumkin. Bunda modda uchun Pa qiymat ayni kasallikka nisbatan farmakologik faollik bo'lsa,Pi qiymat esa shu kasallikka nisbatan farmakologik faol emas ko'rsatkichi qiymati hisoblanadi. Pa >0,71 bo'lsagina modda berilgan kasalliklarga nisbatan farmakologik faolligi yuqori bo'lish ehtimoli yuqori bo'ladi.[1-2]

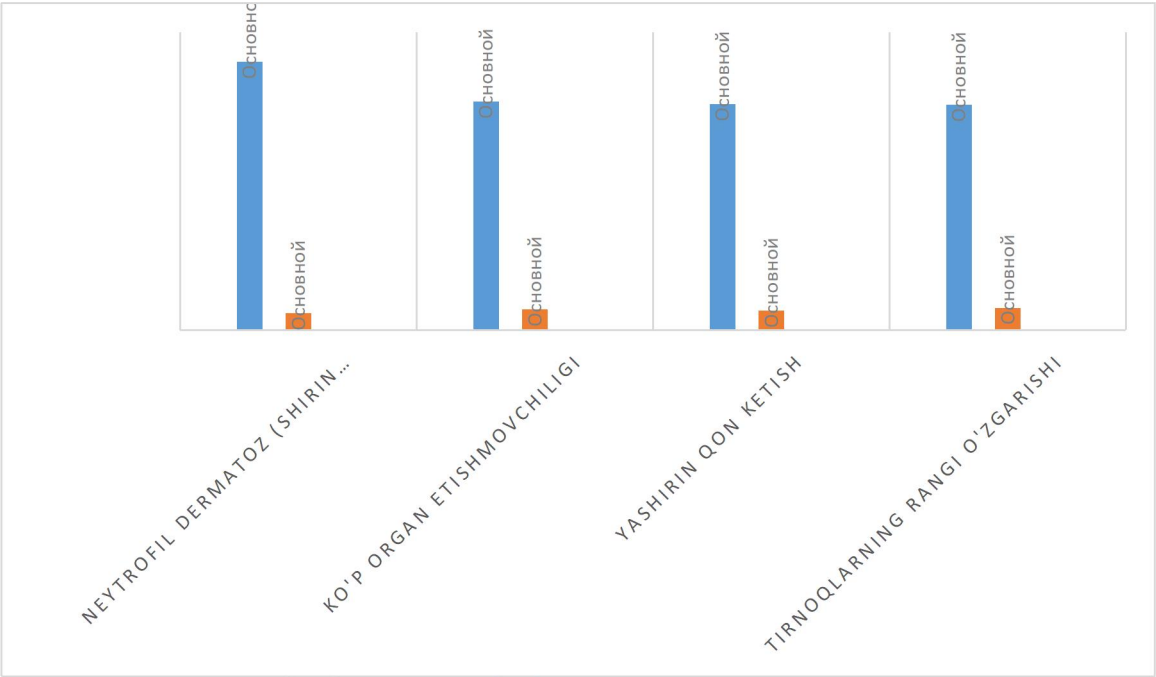
Olingan natijalar tahlili

PASS (online) dasturi ma'lumotlariga nazar solsak dietanolamin va uning xosilalarida ingibitorlik xossalari yuqori ekanligini ko'rishimiz mumkin.

PASS (online) ma'lumotlari asosida dietanolamin va uning xosilalari fobik kasalliklarga nisbatan va turli xil ta'sir etuvchi fermentlarning sekinlantiruvchi yoki bu ferment faolligini to'xtatuvchi ingibitor hisoblanadi.


Основной
Основной
Основной
Основной
Основной
Основной
STAT inhibito...
STAT3...
Aspulvinon...
Lipoksigenaz...


Основной
Основной
Основной
Основной
Основной
Основной
Основной
Основной
Osteoartritni davolash
Toza qizil hujayrali aplaziya
Neytrofil dermatoz (Shirin sindromi)
Ko'p organ etishmovchiligi



1. Dietanolamin
2. N-atsetil dietanolamin
3. N-2-xloratsetildietanolamin
4.N-Propionil Dietanol amin
5.2-xlor N-bis-(1-propioksi) atsetamid

Fobik kasalliklarni davolashga nisbatan dietanolamin va uning xosilalarining farmakologik faolligini PASS dasturida o'rganish natijalari shuni ko'rsatdiki ,eng yuqori farmakologik xususiyatga dietanolamin ega bo'ldi. Lekin dietanolamin kuchli asos xususiyati (pK_a=8.96) bo'lganligi uchun uning asoslik xususiyatini yo'qotish uchun qo'shimcha funksional guruhlar kiritganimizda fobik kasalliklarni davolashda farmakologik faollik kamayadi. Kiritayotgan funksional guruhlarimiz tarkibida galogenlar bo'lsa, farmakologik faollik yana kamayadi.

Eksoribonukleaza II ingibitoriga nisbatan faollik dietanolamin va uning xosilalarida o'rganilganda dietanolamin ning propion kislota angidridi bilan qilgan N- propionil dietanolamin eng samarali ekanligi aniqlandi.

DNK- (apurinik yoki apirimidinli joy) lizaza ingibitori nisbatan faollik dietanolamin ga kiritilayotgan funksional guruh tarkibida Cl atomi bo'lsa keskin kamayishi aniqlandi.

Xulosa

Pass (online) dasturida dietanolamin va uning xosilalarining biologik faolliklari o'rganilganda barcha kasalliklarga nisbatan dietanolamin ning biologic faolligi yuqori bo'ldi,lekin dietanolamin kuchli asos xossasini namoyon qilganligi uchun uning N-xosilarining ichida atsetil bromid va propion angidrid bilan qilgan xosilalarining biologik faolliklari yuqori ekanligi isbotlandi.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. https://www.researchgate.net/publication/12229207_PASS_Prediction_of_activity_spectra_for_biologically_active_substances
2. Нижний С.В., Эпштейн Н.А. «Количественные соотношения «химическая структура – биологическая активность» // Успехи химии. 1978, Т.67, вып.4, с.740.

WORDLY KNOWLEDGE