KIMYO

UDK: 541 - 23.022.246 DOI: 10.56292/SJFSU/vol29_iss4/a81

CHAROPHYCEAE TARKIBIDAN ALGINATLAR AJRATIB OLISH VA XOSSALARINI O‘RGANISH

ИЗВЛЕЧЕНИЕ И ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ АЛЬГИНАТОВ ИЗ CHAROPHYCEAE

EXTRACTION AND PROPERTIES OF ALGINATES FROM CHAROPHYCEAE

Xaitbayev Alisher Xamidovich[1], Xaydarova Sadoqat Salimjon qizi[2]

[1]Xaitbayev Alisher Xamidovich – O‘zbekiston Milliy Universiteti, Organik sintez va amaliy kimyo kafedrasi, professor

[2]Xaydarova Sadoqat Salimjon qizi – O‘zbekiston Milliy Universiteti, Organik sintez va amaliy kimyo kafedrasi, tayanch doktorant

Annotatsiya

Alginatlar suv o‘tlari, ayrim bakteriya va moxlar tarkibida uchraydigan tabiiy biopolimerlardir. Ularning hosilalari gidrokolloid sifatida oziq-ovqat, farmatsevtika, to‘qimachilik va kosmetika sanoatida emulsifikator sifatida ishlatiladi, stomatologiyada qoliplarni tayyorlash uchun hamda, oqava suvlarni tozalash kabi turli sohalarda qo‘llaniladi. Ushbu sharhda, alginatlarning tabiiy manbalari va qo‘llanilish sohalari, suv o‘tlaridan oddiy ekstraksiya va ultratovushli ekstarsiya usullari yordamida ajratib olish usullari, tarkibi va tuzulishini fizik kimyoviy tadqiqot usullar (UB, IQ, RFT) tahlili, Gaussian 09 va Pass on-line dasturlari yordamida olingan nazariy tahlil natijalari keltirilgan.

Аннотация

Альгинаты — это природные биополимеры, содержащихся в составе водорослях, некоторых бактериях и мхах. Их производные используются в качестве гидроколлоидов, эмульгаторов в пищевой, фармацевтической, текстильной и косметической промышленности, в стоматологии для изготовления форм, а также в различных областях, например, при очистке сточных вод. В статье представлены природные источники и применение альгинатов, методы экстракции из водорослей с использованием простой и ультразвуковой экстракции, физико-химические методы исследования (УФ, ИК, РФТ), анализ состава и структуры, реакционная способность, представлены результаты теоретических расчетов программами Gaussian 09 и Pass on-line.

Abstract

Alginates are natural biopolymers found in algae, some bacteria and mosses. Their derivatives are used as hydrocolloids, emulsifiers in the food, pharmaceutical, textile and cosmetic industries, in dentistry for the manufacture of molds, as well as in various fields, such as wastewater treatment. This review presents natural sources and applications of alginates, extraction methods from algae using simple extraction methods and ultrasonic extraction, physico-chemical research methods (UV, IR, XRD), composition and structure analysis, reactivity, Gaussian 09 and Pass on-line results the results of theoretical analysis obtained using

Kalit so‘zlar: *Charophyceae suv o‘ti, alginat kislota, natriy alginat, ultratovushli ekstraksiya, Pass on-line, Gaussian 09, UB, IQ va RFT.*

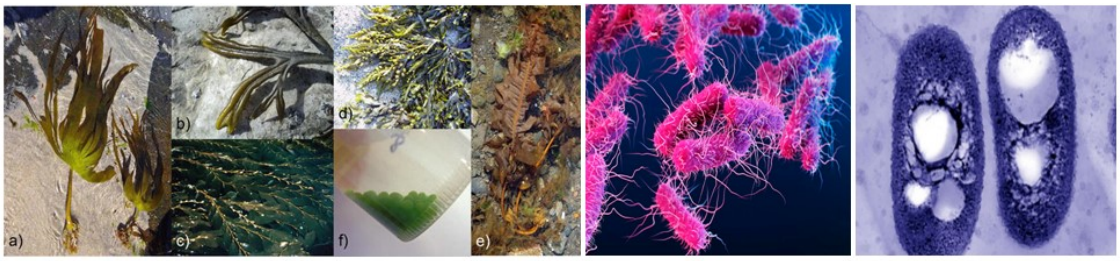
online programs are presented.

Ключевые слова: *Водоросли Charophyceae, альгиновая кислота, альгинат натрия, ультразвуковая экстракция, Pass on-line, Gaussian 09, УФ, ИК и РФТ.*

Key words: *Charophyceae algae, alginate acid, sodium alginate, ultrasonic extraction, Pass on-line, Gaussian 09, UV, IR, XRD*

KIRISH

Alginatlar *Charophyceae* suv o‘tlarining asosiy birikmasi bo‘lib, quruqlikdagi o‘simliklarda sellyuloza funksiyasini bajaradigan biologik qismidir. Alginat suv o‘tlari tarkibida 20 dan 60% gacha tarqalgan bo‘lib, jigarrang tusli suv o‘tlari tarkibida 40% alginat mavjud bo‘ladi. O‘simliklar tarkibida alginatlar natriy va kaltsiy ionlarini o‘z ichiga olgan gel shaklida bo‘ladi [1-2]. Bundan tashqari alginatlar bakteriyalardan ham ajratib olinadi (1-rasm). Opportunistik Patogen bakteriya *Pseudomonas aeruginosad*, Pseudomonasning patogen bo‘lmagan 3 ta turida, jumladan *P.mendocina, P.putida* va *P.fluorescensda* tarkiblarida ham uchrashi qayd etilgan. Shuningdek, tuproq bakteriyalari – *Azotobacter vinelandii* bakterial alginatlar ishlab chiqadi [3-4].



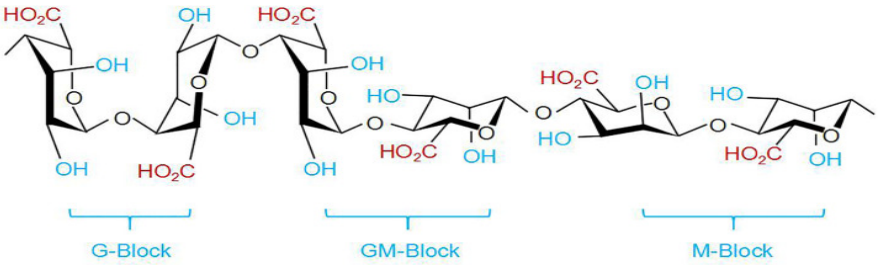
I II

1-rasm. Alginat manbalari. **I.** Suv o‘tlari: a)Laminariya, b)Fucus ceranoides , c)Macrocystis pyrifera, d) Ascophyllum , e)Alaria esculenta f) Xlorella vulgariskaltsiy alginat jel boncuklarda immobilizatsiyalangan. **II.** Bakteriyalar: Pseudomonas aeruginosad va Azotobacter vinelandii

Alginatlar asosan ishlab chiqarish korxonalari, farmatsevtika va kosmetika sanoatida quyuqlashtiruvchi va stabilizator sifatida ishlatiladi. Alginatlarning oziq-ovqat sanoatida qo‘llanilishiga asosiy tartibga soluvchi idoralar, shu jumladan FDA va Evropa Komissiyasi tomonidan ruxsat berilgan va tartibga solingan, bu esa alginatga bo‘lgan qiziqishni yanada oshiradi. Yer yuzida aholining tobora ko‘payib borayotganligi sababli, Osiyoda oziq-ovqat sanoatining o‘sishi, bu hududda alginatga bo‘lgan talabni oshishiga olib keladi. Shuningdek alginatlar, farmatsevtika sanoatida boshqariladigan dori vositalarini ishlab chiqarishda ham foydalaniladi [5]. Yaqin kelajakda fizik, kimyoviy va fermentativ modifikatsiyalar yordamida yangi alginat hosilalarini yaratish orqali shaxsiy davolash va diagnostikada foydalanish imkonini beradi. Bakteriyalar tomonidan alginatning biogenetik sintezini nazorat qilish uchun genetik muhandislikdan foydalangan holda turli xil xususiyatlarga ega yangi alginat hosilalarini ishlab chiqarish muhim muammo bo‘lib qolmoqda. Yuqoridagi ma’lumotlarga asoslangan holda alginatlarni ajratib olish, mahsuldorligi oshirish hamda, yangi hosilalarini sintez qilish dolzarb hisoblanadi. Shuning uchun ham ushbu sharhda alginatning ajratib olish usullari va xossalari amaliy va nazariy o‘rganib chiqildi va yoritib berildi. Alginat manbasi sifatida mahalliy *Charophyceae* ko‘k yashil suv o‘ti tanlab olindi.

ADABIYOTLAR TAHLILI

Alginat tuzilishiga ko‘ra, (1-4)-bog‘langan β-D-mannuron kislota (M) va α-L-guluronning (G) chiziqli sopolimeri bo‘lib, ularning ikkalasi ham piranoza konformatsiyasida, gomogen (MM yoki GG) va geterogen (MG yoki GM) bloklarda joylashgan bo‘ladi. Ularning tuzilish ketma-ketligi, molekulyar massasi va fizik-kimyoviy xossalari suv o‘tlarining turiga, o‘sish sharoitiga qarab turlicha bo‘ladi (2-rasm). Shuningdek suv o‘tlaridan ajratib olingan molekulyar alginatlar bakteriyalar sintez qilgan alginatlardan farq qiladi ya’ni bakterial alginatlarda C_2 yoki C_3 atomlarida atsetil guruhlari mavjuddir.



2-rasm. Algin kislotasining tuzilishi

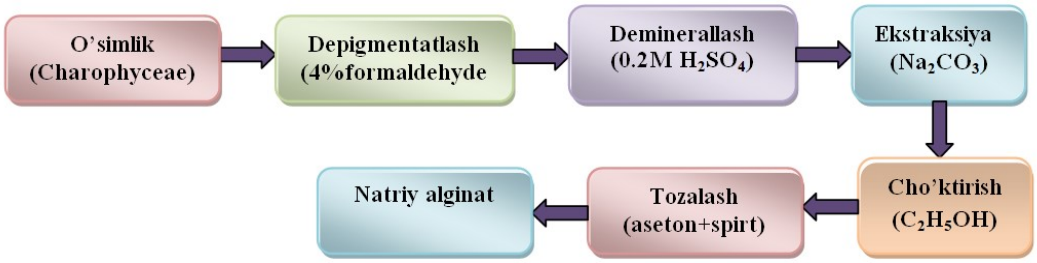
Qishloq xo‘jaligida alginatlardan foydalanish istiqbolli rejalardan hisoblanadi. Algin kislotasi o‘z molekulyar massasiga nisbatan yuz marta ortiq suvni qamrab olish qobiliyati tufayli tuproqda suvni ushlab turadi va namligini uzoq vaqtgacha ta’minlab beradi. Bu esa kam sug‘oriladigan va qurg‘oqchilik yerlarda ekinlar yetishtirish imkonini beradi. Shuningdek, suv o‘tlaridan ajratib olingan alginatlar to‘g‘ridan-to‘g‘ri patogenlarni yo‘q qilishi aniqlangan. Haqiqatan ham, bionazorat agentlari uchun tashuvchi moddasi sifatida ishlab chiqilgan alginat preparatlari o‘simliklarda ko‘p uchraydigan zamburug‘li kasalliklar: *Rizoktoniya, Ascophyllum nodosum, Verticillium* qarshi

kurashda foydalanilgan [6-8]. Alginatlardan tayyorlangan superabsorbentlar (SAP) tuproqni tozalaydi, suvdan foydalanish samaradorligini oshiradi, tuproq o‘tkazuvchanligi va infiltratsiya tezligini oshirib beradi.

Alginat gidrogellari inson organizmidagi makromolekulyar tarkibiy qismlarga biologik mos kelganligi sababli tibbiyotda asosan gidrogel shaklida ishlatiladi va yarani davolash, dori vositalarini etkazib berish hamda to‘qimalarni muhandislik dasturlarida qo‘llaniladi. Ushbu sohada ishlatiladigan va sinovdan o‘tgan alginat iloji boricha toza bo‘lishi kerak, chunki aralashmalar biomaterialning alginat bilan biomosligini buzadi [9-10]. Bundan tashqari, alginat og‘ir metallar bilan zaharlanishga qarshi vosita sifatida xizmat qilishi mumkin va u oziq-ovqat zaharlanishida samarali yordamchi vosita bo‘lishi isbotlangan. Alginatlar tabiiy xelatlashtiruvchi vosita bo‘lib, suvdagi og‘ir metallarning bio-adsorbentidir. Shuning uchun atrof-muhitni muhofaza qilish uchun alginat og‘ir metallarni adsorbenti sifatida keng qo‘llaniladi [11-13].

MATERIAL VA METODLAR

Suv o‘tlari hujayra devorlarining asosiy strukturaviy elementlari polisaxaridlardir. Ular neytral yoki kislotali, chiziqli va tarvaqaylab ketgan polisaxaridlarning aralashmalaridan iborat bo‘ladi. Ushbu polisaxaridlar odatda issiq suv bilan chiqarib yuboriladi, bu mashhur va qulay usul bo‘lishiga qaramay, bu usulning kamchiliklari shundaki, u ko‘p vaqt talab qiladi, yuqori harorat va past ekstraktsiya samaradorligiga ega. Umuman olganda, ekstraksiya usullari metanol/xloroform/suv aralashmasi (2:2:1) yordamida aralashuvchi moddalarni (masalan, past molekulyar og‘irlikdagi birikmalar, lipidlar va alginat namunasidan rangli moddalar) chiqarib yuborishni o‘z ichiga oladi. Suv o‘tlaridan polisaxaridlarni ajratib olishda asosan ekstraksiya usullaridan foydalaniladi [14] va bosqichma–bosqich quyidagi sxema orqali amalga oshirildi (1-sxema).



1-sxema. Suv o‘tidan natriy alginat ekstraksiyasi bosqichlari

Ultratovushli ekstraksiya usuli.

Utratovushli uskuna (Witeg, Germany. 230V-50/60Hz). Bu suv o‘tlaridan polisaxaridlarni olish uchun tobora ommalashib borayotgan yana bir ilg‘or ekstraksiya usulidir. Ultratovush yordamida ekstraksiyaning ta’siri ultratovush to‘lqinlarining tarqalishiga bog‘liq bo‘lib, bu kavitatsiya fenomeniga olib keladi. Kavitatsiya pufakchalarining ta’si natijasida hujayra devorlari orqali diffuziyaga olib kelishi mumkin. Suvda eruvchan polisaxaridlar hujayra devorlari parchalanishi bilan ajralib chiqadi. Ko‘pgina olimlar tomonidan jigarrang dengiz suv o‘tlaridan ultratovush yordamida *Laminarin* ekstraksiya yo‘li bilan olinganligi adabiyotlarda keltirilgan. Ultratovush yordamida olingan bilan an’anaviy usulda olish bilan solishtirganda *Laminarin* miqdori yuqori ekanligi aniqlandi [15]. Ajratib olingan polimerni strukturaviy tahlilini amalga oshirish uchun fizikaviy tadqiqot usullaridan foydalanildi.

Infraqizil spektroskopiya (IQ).

IQ spektroskopiya tahlili INVENIO S (Bruker, Germany) o‘rganish sohasi 400–4000 sm^{-1}. Natriy alginatning asosiy fuksional guruhlari: mannuron kislota funksional guruhi - 856 sm^{-1}, uronik kislota yutulish spektri - 1102 sm^{-1}, gidroksid guruh υ_{OH} - 3349 sm^{-1}, δ_{OH} -792 sm^{-1} va natriy metaliga xos bo‘lgan soha - 447 sm^{-1} intensiv chuqqi hosil qildi.

Rengen fazaviy tahlil (RFT).

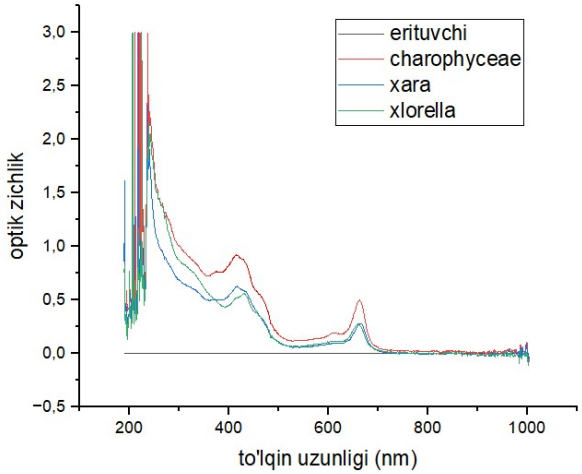
RFT tahlili XRD-6100 model (Shimadzu, Germany). Natriy alginat 2θ = 15.3˚ yuqori intensivlikka ega va 2θ = 24.5˚ past intensiv chuqqilar xosil qildi va kristallik darajasi: 32.54%.

Ultrabinafsha spektroskopiya (UB).

*U*B spektroskopiya tahlili SPECORD 200 PLUS (Analitikjena, Germany) o‘rganish sohasi 190-1100nm.

Depigmentatlash jarayoni.

Dastlab yig‘ib kelingan *Charophyceae* suv o‘tlarni tozalab olindi va quritildi. 20 gr dan olinib, quritilgan suv o‘tlarini pigmentlardan tozalab olish maqsadida metanol/xloroform/suv aralashmasi (2:2:1) bilan ekstreksiya qilindi. Ekstraksiya 2 marta amalga oshirildi, dastlab o‘simlikning quruq massasiga nisbatan 1:2 nisbatda metanol/xloroform/suv aralashmasi solindi, ikkinchi martada esa 1:1 nisbatda solib ekstraksiya 60°C da 2 soat davomida amalga oshirilib 24 soat davomida xona haroratida qoldirildi. Keyin distillangan suv bilan yuvilib 40°C da quritish pechida quritildi. Suv o‘ti tarkibidan qanday pigmentlar ajralib chiqanini bilish uchun UB spektrlari o‘rganildi va tahlil qilindi. UB ma’lumotlariga ko‘ra suv o‘tlarining tarkibida xlorofil (*chlorophyll* β) pigmentlarining 400 nm da yuqori intevsivlik namoyon qilganligini va 650-700 nm sohada past intevsiflikda cho‘qqi hosil qilganligini ko‘rishimiz mumkin. Tahlil natijalari shuni ko‘rsatadiki *Charophyceae* suv o‘tida *chlorophyll β* pigmentining miqdori qolgan ikkita namunaga qaraganda ko‘proq ekan (3-rasm).



3-rasm. *Charophyceae* suv o‘ti tarkibida uchraydigan pigmentlarining UB spektri

Ekstraksiya (1-usul).

Pigmentlardan tozalangan 20 gr *Charophyceae* suv o‘tlari 0.2M HCl kislotasi bilan 4 soat davomida ekstraksiya qilindi. Bunda deminerallash jarayoni sodir bo‘lib o‘simlik tarkibidagi barcha minerallardan tozalanadi. Ma’lum vaqt o‘tgandan so‘ng distillangan suv bilan uch marta yuvilib 2-bosqichda 5% natriy karbonat bilan 2 soat davomida ekstraksiya davom ettirildi. Bu jarayonda o‘simlik tarkibidagi algin kislotasi natriy alginat holatida eritmaga o‘tadi. Algin kislotasining natriy alginatga aylanishi uning suvda eruvchanligini ta’minlab beradi, bu esa uni ajratib olishni osonlashtiradi. Hosil bo‘lgan ekstrakt tsentrifuga qilinib ekstraksiya tarkibidan o‘simlik qoldiqlari yig‘ib olindi. Keyin ekstrakt vakumli filtrdan o‘tkazilib ekstraktga nisbatan 1:3 nisbatda etanol solib polisaxarid cho‘ktirildi. Ekstrakt tarkibidan cho‘ktirilgan natriy alginat filtrlab yig‘ib olinib 2 marta asetonda qayta yuvildi va 40°C quritgich pechda quritildi. Mahsulot o‘simlik quruq massasiga nisbatan 22.5% tashkil qildi (1-sxema).

Ultratovushli ekstraksiya (2-usul).

Utratovushli uskuna (Witeg, Germany. 230V-50/60Hz) bilan 60°C, 40 Hz, 150 V jihozlangan tubi yassi kolbaga 20 gr *Charophyceae* suv o‘tlarni solindi va 0.2M H_2SO_4 kislota eritmasi bilan 1 soat davomida ekstraksiya qilindi. Ma’lum vaqt o‘tgandan so‘ng ekstraksiya tarkibidan o‘simlik qoldig‘i yig‘ib olinib distillangan suv bilam uch marta yuvildi. Olingan mahsulot 5% natriy karbonat bilan 1 soat davomida ekstraksiya qilindi. Xosil bo‘lgan ekstrakt sentrifuga qilinib ekstraksiya tarkibidan o‘simlik qoldiqlari yig‘ib olindi. Natriy alginatni oqartirish uchun ekstraktga 2.5% natriygipoxlorid eritmasidan solindi. Keyin ekstrakt vakumli filtrdan o‘tkazildi va ekstraktga nisbatan 1:3 nisbatda etanol solib polisaxarid cho‘ktiriladi. Ekstrakt tarkibidan natriy alginat filtrlab yig‘ib olinib 2 marta asetonda qayta yuvildi va 40°C quritgich pechda quritildi. Mahsulot, o‘simlik quruq massasiga nisbatan 25.5 % tashkil qildi.

Ajratib olingan natriy alginatning tozaligini aniqlash.

Suv o‘tidan olingan alginatlar bilan birga odatda qo‘shimcha moddalar ham chiqishi mumkin. Ajratib olingan natriy alginatning tozaligini baholash maqsadida flavonoidlar, alkaloidlar, terpenoidlar va fenollar mavjudligini tahlil qilish qilish uchun sifat reaksiyalari bilan aniqlab ko‘rildi.

Natriy alginat tarkibidan flavonoidlarni aniqlash.

Flavonoidlar mavjudligini tahlil qilish uchun 0,5 g natriy alginat suyultirilgan NaOH eritmasida eritildi va keyin HCl qo‘shilganda eritma rangi o‘zgarmadi. Natijada olingan mahsulot tarkibida flavanoidlar yo‘qligi isbotlandi.

Natriy alginat tarkibidan alkaloidlarni aniqlash.

Alkaloidlarning mavjudligini tahlil qilish uchun 0,5 g natriy alginat 10 ml suyultirilgan HCl (0,1N) da eritildi va filtrlandi. Filtratdan alkaloidlar borligini tekshirish uchun foydalanildi. Bunda 3 ml filtratga 1 ml 1% HCl qo‘shildi va bir necha tomchi Meyer reaktivi (simob xlorid (1,36 g) va kaliy yodid (5,00 g) aralashmasini suvda (100,0 ml) eritiladi) bilan ishlov berildi. Reaksiya natijasida kremsimon oq cho‘kma hosil bo‘lmasligi, ajratib olingan mahsulot tarkibida alkaloidlar mavjud emasligidan dalolat berdi.

Natriy alginat tarkibidan fenollarni aniqlash.

Fenol birikmalar mavjudligini tahlil qilish uchun 100 mg mahsulot 1 ml distillangan suv bilan qaynatilib filtrlandi. 2 ml filtrat ustiga 2 ml 1% $FeCl_3$ eritmasi qo‘shildi. Natijada hech qanday o‘zgarish sodir bo‘lmadi. Bunda moviy qora rangning paydo bo‘lishi fenol mavjudligini ko‘rsatadi.

Natriy alginat tarkibidan oqsillarni aniqlash.

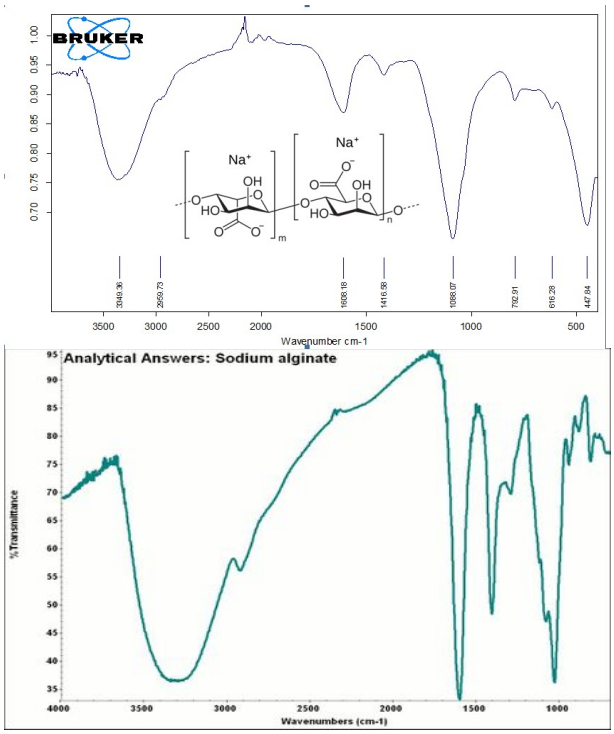
Oqsillar mavjudligini tahlil qilish uchun Biuret reaksiyasi va Ningidrin reaksiyasi amalga oshirildi. 0.01gr mahsulot ustiga 10% li natriy gidroksid eritmasidan 2-3 ml quyilib, unga mis sulfatning 0,2% li eritmasidan bir necha tomchi tomizilganda eritma och binafsha rangga bo‘yaldi. Olingan natija, olingan mahsulot tarkibida natriy alginat bilan birga oqsil qo‘shimcha modda sifatida ajralib chiqgan.

Natriy alginatni oqsillardan tozalash.

Natriy alginatni oqsillardan tozalash uchun ajratib olingan mahsulotni 1% li sirka kislotasi eritmasida qayta–qayta eritish natijasida tozalandi. Bunda qo‘shimcha modda sifatida hosil bo‘lgan oqsillar cho‘kdi. Keyin eritma filtrlab olindi hamda natriy karbonat bilan neytrallandi va spirt bilan cho‘ktirildi. So‘ngi bosqichda aseton bilan qayta cho‘ktirish usuli yordamida tozalandi.

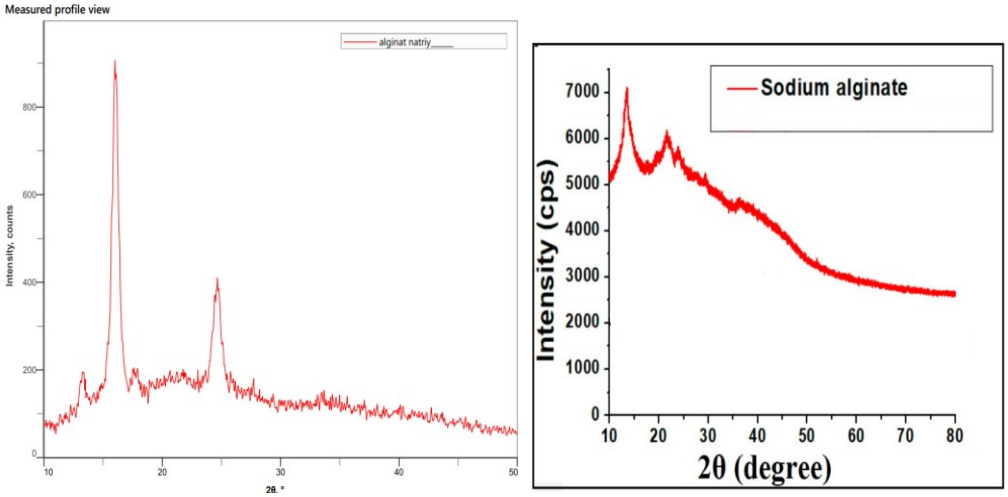
Natriy alginatning IQ va RFT tahlili.

Suv o‘tlaridan ajratib olingan natriy alginatni tuzilishini o‘rganish maqsadida fizikaviy tadqiqot usullaridan foydalanildi. Infraqizil (IQ) spektrokopiya usulining tahliliga ko‘ra ajratib olingan modda tarkibida: mannuron kislota funksional guruhi - 856 sm^{-1}, uronik kislota yutulish spektri - 1102 sm^{-1}, gidroksid guruh υ_{OH} - 3349 sm^{-1}, δ_{OH} -792 sm^{-1}, sp^3-s bog‘langan υ_{C-H} guruh 2959 sm^{-1} va piran halqasiga xos bo‘lgan yutulish signallari 1000-400 sm^{-1} sohalarda namoyon bo‘lganligi adabiyotdagi ma’lumotlar bilan solishtirilganda bir xil ekanligi aniqlandi.



4-rasm. Ajratib olingan natriy alginatning IQ spektri

Olingan moddamizning kristallik darajasini o‘rganish maqsadida Rengen fazali tahlil (RFT) usulidan foydalanildi. Tahlil natijasiga ko‘ra natriy alginatning 2θ = 15.3˚ yuqori intensivlikka ega va 2θ = 24.5˚ past intensiv cho‘qqi namoyon bo‘ldi. Adabiyotlar bilan solishtirilganda to‘g‘ri ekanligi isbotlandi. *Charophyceae* suv o‘tlari tarkibidan ajratib olingan natriy alginatning kristallik darajasi: 32.54% tashkil qildi. Odatda natriy alginat RFT tahliliga ko‘ra 2θ = 10˚- 20˚ orasida yuqori va 2θ = 20˚- 25˚ darajalar orasida past intensivlik cho‘qqini namoyon qiladi. Ularning bu darajalar orasidagi farq bo‘lishi tabiiy hol chunki natriy alginatning xossalari olinish manbasiga qarab farqlanadi.



5-rasm. Ajratib olingan natriy alginatning RFT natijalari

Natriy alginatning molekulyar massasini aniqlash.

Natriy alginatdan 0.1 gr ni analitik tarozida tortib so‘ngra bufer eritma (0.2M NaCl va 0.1M CH_3COOH)da eritib olindi. Viskozimetrda dastlab namuna sifatida bufer eritmaning o‘tishi

tekshirilganda 25˚C da o‘rtacha 63 sekundda oqib o‘tdi. So‘ngra, Natriy alginatning qovushqoqligi eritmani ketma-ket (turli foizlarda) suyultirish orqali aniqlandi.

1-jadval

Natriy alginatning molekulyar massasi

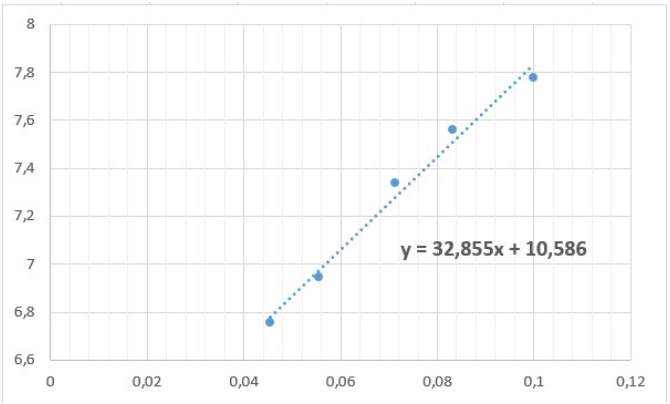
Eritma kontsentratsiyasi	t_0 (bufer eritma)	t_1	$\eta_{nis=1/}t_0$	$\eta_{sol=}\eta_{nis-1}$	$\eta_{kel=}\eta_{sol/c\%}$	Natriy alginat Mr
1%	63	112	1.777	0.777	7.777	**17.8015 kD**
0,5%		103	1.629	0.629	7,558	
0,25%		96	1.523	0.523	7.336	
0,125%		88	1.386	0.386	6.946	
0.0625%		83	1.306	0.306	6.757	

Natriy alginatning molekulyar massasini viskozimetrik usulda aniqlashning boshqa usullardan afzalligi bu usulning soddaligi va osonligidadir. Lekin bu usulni qo‘llash molekulyar massa bilan qovushqoqlik orasidagi bog‘liqlik konstantalarini bilishni talab qiladi va bu ko‘rsatkichlar yuqorida 1-jadvalda keltirilgan. Yuqori molekulali moddalarda qovushqoqlik bilan o‘rtacha molekulyar massa orasidagi Mark-Kun-Xouvink tenglamasi orqali ifodalanadi.

$$/\eta/ = KM^{\alpha}$$

bu yerda, /ŋ/- dinamik qovushqoqlik; K va M polimer strukturasiga bog‘liq bo‘lgan va eritma bilan o‘zaro ta’sirni tavsiflovchi ko‘rsatgichlar.

Charophyceae suv o‘tlaridan ajratib olingan natriy alginatning molekulyar massasi: 17.8015kD Mark-Kun-Xouvink tenglamasi orqali hisoblab topildi.



6-rasm. Ajratib olingan natriy alginatning xarasteristik qovushqoqligi

Natriy alginatning reaksion qobilayatlarini Gaussian 09 dasturi yordamida tahlil qilish

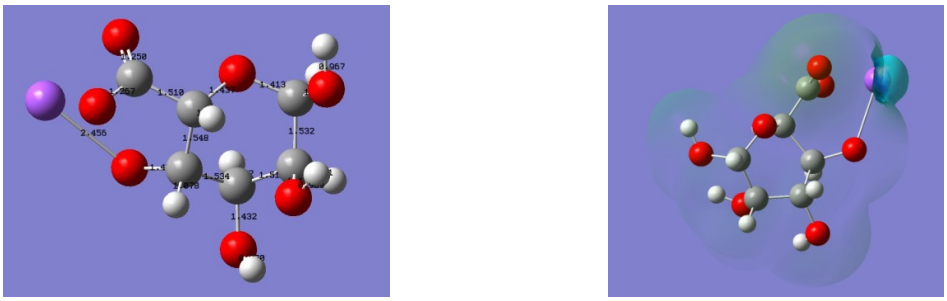
Natriy alginatning tuzlishi Gaussian dasturida nazariy o‘rganildi. Bunda hisoblash natijalari (Gaussian 09 dasturi paketida Ground state, DFT, Undestricted, B3LYP) usuli asosida 6-311G basis o‘rnatmasida olib borildi. Yordamchi dasturlar sifatida Avagadro 1.2.0. GaussView 6.0.16. va HyperChem dastur paketlaridan ham foydalanildi [16]. Ajratib olingan natriy alginatning termokimyoviy xossalarini yuqorida ko‘rsatilgan dastur va usuldan foydalanib hisoblab chiqildi (2-jadval).

2-jadval

Natriy alginatning ayrim termokimyoviy xossalari

Nol nuqtali tuzatish (Hartree/Particle)	0.154059
Entalpiyaga termal tuzatish	0.166428
Energiyaga termal tuzatish	0.165483
Erkin Energy ga termal tuzatish	0.115768
Elektron va nol nuqtali energiya yig‘indisi	-921.880198
Elektron va termal entalpiyalar yig‘indisi	-921.867829

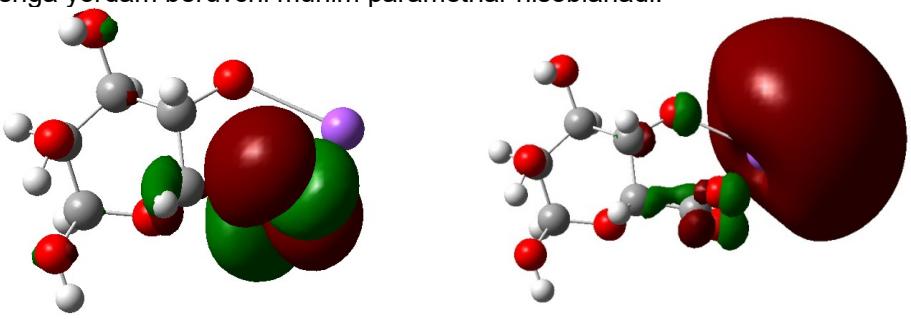
Elektrostatik potentsial (ESP) molekulyar modellashtirishda molekulalarning xatti-harakatlarini va ularning boshqa molekulalar bilan o‘zaro ta'sirini tushunish va bashorat qilish uchun foydalaniladi. Hisoblash kimyosida ESP odatda elektrostatik potentsialni molekulaning zaryad taqsimotiga bog‘laydigan Puasson tenglamasini yechish orqali hisoblanadi (7-rasm).



(A) (B)

7-rasm. Natriy alginatning A-bog‘ uzunligi va B-elektrostatik potentsiali

Hisoblash kimyosidan ma’lumki HOMO va LUMO mos ravishda yuqori band bo‘lgan va quyi bo‘sh molekulyar orbitalni anglatadi (8-rasm). Ushbu orbitallar molekulalarning kimyoviy va fizik xususiyatlarini aniqlashda muhim rol o‘ynaydi. HOMO elektronlarni o‘z ichiga olgan eng yuqori energiya darajasiga ega orbital sanaladi. Bu esa bizga molekulaning ionlanish potentsiali, reaktivligi va barqarorligini aniqlashga imkon beradi. Bundan kelib chiqib natriy alginatning ushbu HOMO ko‘rsatkichlarini nazariy aniqlaganimizda EH =-0,23335eV teng ma’lum bo‘ldi. LUMO esa molekulada bo‘sh bo‘lgan eng past energiya darajasiga ega bo‘lgan orbital hisoblanadi. U molekulaning elektronni qabul qilib olish qobiliyatini ifodalaydi, elektrofil hujum va radikal mexanizm asosida boruvchi reaktsiyalarda ishtirok etadi. Ushbu dastur yordamida natriy alginat LUMO energiyasini aniqlash natijasida molekulaning elektronga yaqinligi, reaktivligi, barqarorligiga ta’sir qilishini nazariy jihatdan hisoblab chiqildi: E_L = -0,04242eV. Bundan biz, HUMO va LUMO energiya farqi: natriy alginat ΔE = -0.19093 teng ekanligi orbitallarning asosiy holati va birinchi qo‘zg‘atilgan holati o‘rtasidagi yuzaga kelgan o‘zgarishlar haqida ma’lumotga ega bo‘ldik. Bu energiya farqi molekulaning elektron yutilish spektri, reaktivligi, barqarorligi kabi kimyoviy va fizik xususiyatlari haqida xulosa qilishga yordam beruvchi muhim parametrlar hisoblanadi.



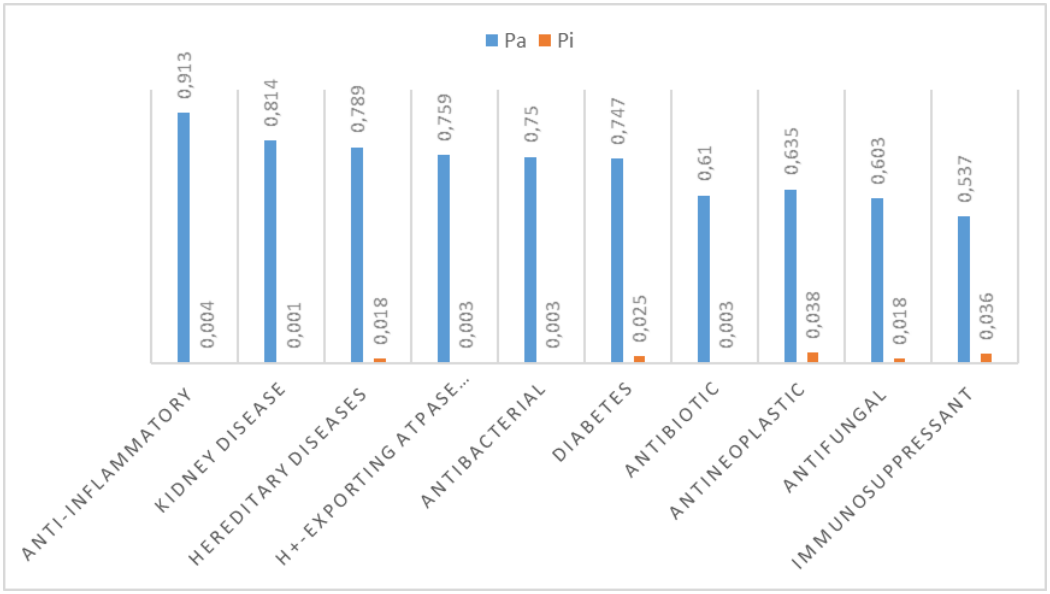
(A) (B)

8-rasm. Natriy alginatning A- HUMO orbitali va B- LUMO orbital

Natriy alginatning biologik faolligini Pass on-line dasturi yordamida nazariy tahlil qilish.

PASS (on-line) dasturi ma'lumotlariga asoslangan holda natriy alginatning yallig'lanish kasalliklariga, qandli diabet hamda nafas yo'llarining siqilishiga qarshi yuqori aktivlikni namoyon qildi [17]. Shuningdek hozirgi kunda dolzarb muammolardan biri hisoblangan COVID-19 pandemiyasi kontekstida endosomal kislotalanishda (H^+-exporting ATPase inhibitor) va V-ATPase faolligining virusli infeksiyalardagi markaziy ahamiyati katta ekanligini ko'rishimiz mumkin. Inson organizmda Suksinat-KoA ligaza fermentining yetishmovchiligi natijasida miya va boshqa tana tizimlarining erta rivojlanishiga ta'sir qiladigan irsiy kasalliklarni olib keladi natriy alginatning organizmda Benzoat-KoA ligaza fermentining ingibitorlovchi xossasi tufayli yuqoridagi genetik kasalikni rivojlanishini oldini oladi (9-rasm).

PASS (on-line) ma'lumotlari asosida natriy alginatning qandli diabet, antibakterial, antineoplastic (antitumor) va yallig'lanishga qarshi vosita ekanligini nazriy o'rganib chiqildi (9-rasm).



9-rasm. Natriy alginatning PASS (online) dasturida nazariy jihatdan aniqlangan biologik faolliklari.

XULOSA

Natriy alginat umuniy formulasi - $NaC_6H_7O_6$ oq-sarg'ish rangli kukunsimon modda bo'lib *Charophyceae* suv o'tlaridan ikki xil ekstraksiya usul bilan ajratib olindi va optimal sharoitlari o'rganildi. Oddiy ekstraksiya usulda unum 22.5 % va ultrtovushli ekstraksiya usuli natijasida natriy alginat yuqori unum 25.5% bilan hosil bo'ldi. Ajratib olingan mahsulot tozaligini baholash maqsadida flavonoidlar, alkaloidlar, fenollar va oqsillar mavjudligini tahlil qilish uchun sifat reaksiyalari bilan taxlil qilib ko'rildi, hamda qo'shimcha oqsillardan tozalandi. Natriy alginatlarning tuzilishi va tarkibini o'rganish maqsadida fizikaviy tadqiqot usullaridan IQ, RFT va UB usullardan foydalanib tahlil qilindi va adabiyotdagi natijalar bilan bir xil ekanligi isbotlandi. Natriy alginatning molekulyar massasi: 17.8015kD va kristallik darajasi: 32.54% tashkil qildi. Uning ayrim termokimyoviy xossalari va reaksion qobiliyatlari Gaussian dasturida o'rganildi. PASS (online) ma'lumotlari asosida natriy alginatning qandli diabet, antibacterial, antineoplastic (antitumor) va yallig'lanishga qarshi faollik ko'rsata olishi nazariy jihatdan aniqlandi.

ADABIYOTLAR RO'YXATI

1. Sudha P, Dengiz biopolimerlarini sanoatda qo'llash. Boka Raton: CRC Press; 2017. – bet 626.
2. Haug A, Smidsrod O. Alginatlarning stronsiy-kaltsiy selektivligi. Tabiat. 1967. 215(5102), – bet 757.

3. Clementi F., Fantozzi P., Mancini F., Moresi M. Azotobakter vinelandi tomonidan alginat ishlab chiqarish uchun maqbul shartlar. Ferment. Mikrob. Texnol. 1995 yil. 17: 983 –988. doi: 10.1016/0141-0229(95)00007-0.

4. Skjak-Brek G, Grasdalen H, Larsen B. Ayrim bakterial alginatlarda monomer ketma-ketligi va atsetillanish sxemasi. Karbongidrat tadqiqotlari. 1986. 154(1). 239-250

5. High G., High M., Alginat bozor tahlili. Ilova va segmentlar prognozlari. 2017. – bet 127.

6. Jayaraj J, Wan A, Rahman M, Punja Z. Dengiz o‘tlari ekstrakti sabzidagi barg qo‘ziqorin kasalliklarini kamaytiradi. Ekinlarni himoya qilish. 2008. 27(10). – bet 1360-1366

7. Craigie J. O‘simlikshunoslik va qishloq xo‘jaligida dengiz o‘tlari ekstrakti stimullari. Amaliy fizikologiya jurnali. 2011. 23(3). – bet 371-393.

8. Abd El-Rehim HA, Ionlashtiruvchi nurlanish bilan tayyorlangan poliakrilamid / natriy alginat o‘zaro bog‘langan gidrogellarning tavsifi va qishloq xo‘jaligida qo‘llanilishi. Amaliy polimer fanlari jurnali. 2006.101(6). – bet 3572-3580.

9. Lee KY, Mooney DJ. Alginat: xususiyatlari va biotibbiy qo‘llanilishi. Polimer fanidagi taraqqiyot. 2012. 37(1). – bet 106-126.

10. Lee KY, Mooney DJ. To‘qimachilik muhandisligi uchun gidrogellar. Kimyoviy sharhlar. 2001.101(7). – bet 1869-1879.

11. Eliaz I, Weil E, Wilk B. Integral tibbiyot va o‘zgartirilgan sitrus pektinlari, alginatlarining og‘ir metallarni xelyatsiya qilish va detoksifikatsiya qilishdagi roli - beshta holat bo‘yicha hisobot. Forschende Komplementärmedizin. 2007.14(6). – bet 358-364.

12. Abdul Khalil H, Saurabh C, Tye Y, Lai T, Easa A, Rosamah E, Oziq-ovqat va farmatsevtika dasturlari uchun dengiz o‘tlariga asoslangan barqaror plyonkalar va kompozitsiyalar: sharh. Qayta tiklanadigan va barqaror energiya bo‘yicha sharhlar. 2017. 77. – bet 353-362

13. Khaydarova S.S., Siddiqova S.Q., Khaitbaev A.Kh., *Charophyceae* suv o‘tidan Natriy alginatni ekstraksiya qilish . Chem. Proc. 2022. 4. – bet. 1-3

14. Khaitbaev A.Kh., Khaydarova S.S. Natriy alginatining tabiatda tarqalishi va olinishi. O‘zbekiston-Yaponiya “Energiya-Yer-atrof-muhit-muhandislik” xalqaro konferensiyasi. 2022. – b. 121

15. Kadam S.U., Tiwari B.K. O‘Donnell, C.PDengiz suvo‘tlaridan bioaktivlarni olishning yangi texnologiyalarini qo‘llash. J. Agrik. Oziq-ovqat kimyosi. 2013. – bet. 4667-4675

16. Khaitbaev A.Kh., Khaydarova S.S. Gaussian dasturida natriy alginat tuzilishini nazariy o‘rganish. “O‘zbekiston Milliy Universitetining ilm-fan rivoji va jamiyat taraqqiyotida tutgan o‘rni” mavzusidagi xalqaro ilmiy-amaliy konfrensiya, Toshkent. 2023.–b. 23-24

17. Khaitbaev A.Kh., Khaydarova S.S, Toshov X.S va Shokirov M.T. Pass on-line dasturlarida alginatlarning biologik faolligini o‘rganish. «Umidli kimyogarlar-2023» XXXII ilmiy-texnikaviy anjumanning maqolalar to‘plami. 2023. –b. 23-24.