O‘ZBEKISTON RESPUBLIKASI

OLIY TA’LIM, FAN VA INNOVATSIYALAR VAZIRLIGI

FARG‘ONA DAVLAT UNIVERSITETI

FarDU. ILMIY XABARLAR

1995-yildan nashr etiladi
Yilda 6 marta chiqadi

5-2025
TABIIY FANLAR

НАУЧНЫЙ ВЕСТНИК. ФерГУ

Издаётся с 1995 года
Выходит 6 раз в год

MUNDARIJA

KIMYO

Sh.A.Obidova, I.R.Askarov
Chemical composition and antioxidant activity of *Matricaria chamomilla* L., *Jasminum officinale* L. *and Urtica dioica* L.: importance in folk medicine and pharmaceuticals 6
A.A.Ibragimov, J.I.Tursunov, H.N.Abdikunduzov, M.X.Jo'rayeva
Fargona davlat universitetida ishlab chiqarilayotgan *Cistanche mongolica* biologik faol qo'shimchasiga(BFQ) kimyoviy tarkibi asosida kod raqamini belgilash 13
Sh.Sh.Turg'unboyev
Betulin kislotasining energetik va geometrik parametrlarini eksperimental o'rganish 21
X.B.Musayev, I.R.Yoqubov
Neft va gaz sanoati chiqindi suvlarini tozalash uchun Co va Ni legirlangan TiO_2 ning zol-gel sintezi va xossalari 27
M.E.Ziyadullayev, S.E.Nurmanov, F.X.Bo'riyev, G.Q.Otamuxamedova
Ayrim aromatik aldegidlarni grinyar reaktivi yordamida enantioselektiv alkinillash 33
I.R.Asqarov, G.S.Kimsanova
Determination of flavonoids in the fruit pericarp of horse chestnut (*Aesculus hippocastanum* L.) .. 42
S.Sh.Do'saliyeva, V.U.Xo'jayev
Allium karataviense o'simligi takibidagi saponinlarning sifat taxlili 47
K.A.Qurbonaliyev
Yangi avlod qozonxona yoqilg'ilarining rivojlanishi: jahon va milliy kimyoviy tadqiqotlar tahlili 50
I.R.Asqarov, Sh.H.Abdulloyev, F.A.Aliyeva, O.Sh.Abdulloyev, B.N.Sattarova
Determination of the content of chemical elements in the "Asfam" food additive. 54
O.M.Nazarov, I.A.Yusupov
Taxonomy, ecological significance and phytochemical (Carbohydrate) analysis of *Schoenoplectus lacustris subsp.* Hippolyti 60
Q.M.Sherg'oziyev
Anabasis aphylla L. yer ustki qismi va endofitlarining vitamin tarkibini YSSX usulida tahlil qilish 67
D.A.Eshtursunov, D.J.Bekchanov, M.G.Muxamediyev
Comparative thermal degradation behaviour of pristine and modified polyvinyl chloride: influence of CUO and FE_3O_4 nanoparticles 70
I.IXoldarov, S.A.Mamatqulova
Farg'ona viloyati (Farg'ona shahar, Buvayda tumani) da o'sadigan tribulus terrastris (temirtikan) o'simligining kimyoviy va elementar tarkibi, xalq tabobatidagi o'rni 77
O.M.Nazarov, I.A.Yusupov
Schoenoplectus triqueter o'simligining ekotizim barqarorligini ta'minlashdagi ro'li, tibbiy va ekologik ahamiyati 81
M.A.Axmadaliev, M.M.Axmadalieva, G.M.Xudoynazarova
Sanoat chiqindilari asosida olingan erituvchilarni ishlatish yo'llari 86
Г.М.Икромова, А.М.Каримов, Э.Х.Ботиров
Терпеноиды и стерины корней perovskia kudrjaschevii 91
X.N.Saminov
Namozshomgul o'simligining makro va mikroelement tarkibini o'rganish 96
A.X.Xaitbayev, Sh.X.Karimov
Xitozanni edta yordamida modifikatsiyalash 102
N.B.Pirnazarova, G'.R.Nematov
2-metil-6-nitroxinazolin-4-onning vilgerodt-kindler reaksiyasini amalga oshirish 108

FarDU. Ilmiy xabarlar – Scientific journal of the Fergana State University

Volume 31 Issue 5, 2025-yil DOI: 10.56292/SJFSU/vol31_iss5/a109

UO'K: 547.972:544.6

BETULIN KISLOTASINING ENERGETIK VA GEOMETRIK PARAMETRLARINI EKSPERIMENTAL O'RGANISH

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ И ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ БЕТУЛИНОВОЙ КИСЛОТЫ

EXPERIMENTAL STUDY OF THE ENERGETIC AND GEOMETRIC PARAMETERS OF BETULINIC ACID

Turg'unboyev Shavkatjon Shuhratjon o'g'li
Farg'ona davlat universiteti, k.f.b.f.d., (PhD), dotsent

Annotatsiya

Ushbu maqolada betulin kislotasining geometrik va energetik parametrlarini o'rganish natijalari yoritilgan. Tadqiqotlarda Avogadro, HyperChem va ChemOffice dasturlaridan, shuningdek DFT, MD, QSAR va molekulyar docking kabi zamonaviy yondashuvlardan foydalanigan. Hisoblashlar natijasi sifatida hosil bo'lish energiyalari, bog' uzunliklari, elektron tuzilish parametrlarining farqlanishi va molekulyar barqarorlik darajalari aniqlangan. Olingan natijalar betulin kislotasining farmatsevtika va nanomateriallarda qo'llanish istiqbollarini yoritib beradi.

Аннотация

В данной статье представлены результаты исследования геометрических и энергетических параметров бетулиновой кислоты. В исследованиях использовались программы Avogadro, HyperChem и ChemOffice, а также современные подходы, такие как DFT, MD, QSAR и молекулярный докинг. В результате расчетов были определены энергии образования, длины связей, различия в параметрах электронной структуры и степени молекулярной стабильности. Полученные результаты раскрывают перспективы применения бетулиновой кислоты в фармацевтике и наноматериалах.

Abstract

This article presents the results of a study on the geometric and energy parameters of betulinic acid. The research utilized Avogadro, HyperChem, and ChemOffice software, as well as modern approaches such as DFT, MD, QSAR, and molecular docking. The calculations determined formation energies, bond lengths, differences in electronic structure parameters, and the degree of molecular stability. The obtained results reveal promising prospects for the application of betulinic acid in pharmaceuticals and nanomaterials.

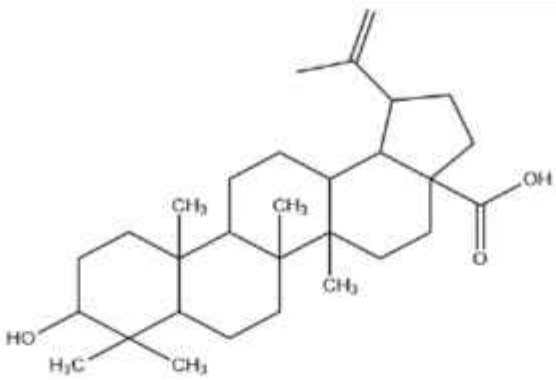
Kalit so'zlar: *betulin kislotasi, energetik parametrlar, Avogadro, HyperChem, DFT, molekulyar docking, molekulyar dinamika.*

Ключевые слова: *бетулиновая кислота, энергетические параметры, Avogadro, HyperChem, DFT, молекулярный докинг, молекулярная динамика.*

Key words: *betulinic acid, energy parameters, Avogadro, HyperChem, DFT, molecular docking, molecular dynamics.*

KIRISH

Yuqori biologik faollikga ega bo'lgan betulin kislotasi ko'plab daraxtlarning po'stlog'ida, ayniqsa, *Betula* turkumiga mansub o'simliklarda uchraydi. Ushbu birikma turli o'simtalarga qarshi, antivirus, antibakterial va yallig'lanishga qarshi xususiyatlari bilan farmatsevtika sohasida katta ilmiy qiziqish uyg'otmoqda. Betulin kislotasining tuzilishi murakkab bo'lib, uning barqarorligi va biologik faolligini tushunish uchun molekulyar darajadagi chuqur hisoblashlar talab etiladi (1-rasm).



1-rasm. Betulin kislota

So'nggi yillarda kompyuter kimyosidagi yutuqlar tufayli molekulalarning xossalarini oldindan aytib berish imkoniyati kengaydi. Avogadro dasturi molekulalarning 2D va 3D ko'rinishlarini yaratish, kuch maydonlari asosida energetik hisoblashlarni amalga oshirish uchun qulay vosita bo'lsa, HyperChem va ChemOffice dasturlari yanada murakkab model va integratsiyalashgan kvant-kimyoviy hisoblarni bajarish imkonini beradi. Shu sababli betulin kislotasini nazariy va eksperimental jihatdan chuqur o'rganish farmakologiya va materialshunoslik uchun strategik ahamiyat kasb etadi.

ADABIYOTLAR TAHLILI VA METODOLOGIYA

Bir qator ilmiy izlanishlarda betulin kislotasining energetik xossalari turli metodlarda tadqiq etilgan. Jumladan, Avogadro dasturida MMFF94, MMFF94s, UFF va GAFF kuch maydonlari asosida geometriya optimallashtirish bajarilib, hosil bo'lish energiyalari va bog' uzunliklari hisoblangan. Natijalar shuni ko'rsatadiki, Chemical metodida maksimal energiya qiymati kuzatilgan bo'lsa, MMFF94 va MMFF94s metodlari nisbatan barqaror hamda aniqligi yuqori hisoblanadi. HyperChem dasturida esa BIO+(CHARMM) kuch maydonida betulin kislotasining hosil bo'lish energiyasi eng yuqori qiymatga ega bo'lib, OPLS metodida esa minimal natijalar qayd etilgan. ChemOffice dasturida MM2 metodidan foydalanilganda energiya qiymatlari ancha past bo'lib, bu metodning hisoblash samaradorligi yuqori emasligini ko'rsatadi. Shuningdek, DFT hisoblari va molekulyar dinamika (MD) yondashuvlari asosida betulin kislotasining turli oqsillar bilan o'zaro ta'siri chuqur tahlil qilingan. MM-PBSA va MM-GBSA metodlari yordamida ΔGbind qiymatlari aniqlanib, betulin kislotasining LXR reseptori bilan barqaror kompleks hosil qilishi isbotlangan [1]. Betulin kislotaning ferment tizimlarida bog'lanish energetikasi α-glukozidaza bilan o'zaro ta'sirini o'rganganilgan bo'lib, kompleks uchun o'rtacha bog'lanish erkin energiyasi −18.53 ± 3.44 kcal/mol deb hisoblangan [2]. Shu bilan birga, SAR QSAR ishida BA ning hazm fermentlariga (α-amilaza, α-glukozidaza, pankreatik lipaza va α-kimotripsin) bog'lanish mexanizmlari DFT (frontier orbitalar, MEP) va MD orqali tavsiflanib, barqaror komplekslar hosil bo'lishi tasdiqlangan [3]. Nanotexnologiya sohasida olib borilgan izlanishlarda betulin kislotasining bor nitrid nanotrubkalari sirtiga adsorbsiyasi DFT va MD yordamida o'rganilib, ichki sirtga bog'lanish energetik jihatdan afzalroq ekani aniqlangan [4]. Ushbu natijalar betulin kislotasining nanomateriallar bilan integratsiyasi farmatsevtika uchun yangi imkoniyatlar yaratishini ko'rsatadi. Shuningdek, strukturaviy-elektron xususiyatlar va docking energetikasi nuqtayi nazaridan C-3/C-20 pozitsiyalari o'zgartirilgan betulin kislota hosilalarida DFT (B3LYP/6-311G(d,p), SMD-suv) optimizatsiyalari bajarilib, bir qator maqsad oqsillarga docking ballari −7.2 kkal/mol (MMP-2, PARP-1) va −6.7 kcal/mol (TRAF2) diapazonida chiqdi; Desmond asosidagi MD esa komplekslarning barqarorligini tasdiqlagan [5]. Umuman olganda, ko'rib chiqilgan ishlar betulin kislota va hosilalarining oqsil nishonlarga bog'lanishida van-der-Vaals komponenti ustunligini, MM-PBSA/MM-GBSA bo'yicha ΔGbind ning o'nlab kcal/mol manfiy diapazonda ekanini va DFT darajasida HOMO–LUMO va MEP tahlillari orqali reaksion markazlarni aniq belgilash mumkinligini ko'rsatadi. Bu xulosalar betulin kislota asosida maqsadli sintez va strukturaviy optimallashtirish uchun barqaror hisob-eksperimental tajribalar olib borish muhim ekanligini anglatadi.

NATIJALAR VA MUHOKAMA

Dastlab, betulin kislotasining ba'zi geometrik va energetik parametrlarini eksperimental o'rganish uchun Avogadro, Hyperchem, ChemOffice dasturlaridan foydalanildi. Natijalar Avogadro

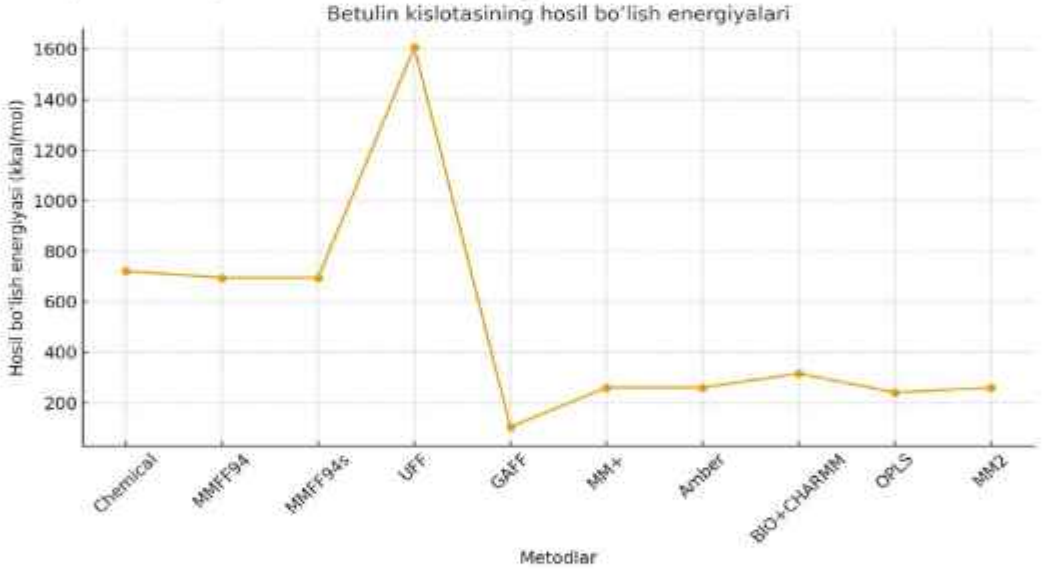
dasturining Chemical, MMFF94, MMFF94s, UFF metodlarida; Hyper chem dasturining *MM+, AMBER, BIO+CHARMM, OPLS* kabi molekulyar mexanikaning kuch maydonlarida hosil bo'lish issiqliklari o'rganildi. Olingan natijalar 1-jadval va 2-rasmda o'z ifodasini topgan.

1-jadval

Betulin kislotasining HyperChem, Avogadro va Chem Office dasturlarida hisoblangan hosil bo'lish issiqliklari (kkal/mol)

HyperChem				Avogadro				Chem Office
MM+	*Amber*	*BIO+ CHARMM*	*OPLS*	*Chemical*	*MMFF94*	*MMFF94s*	*UFF*	*MM2*
260.4666	260.4666	316.296	240.989	721.438	695.198	695.159	1606.06	104.8499

Hisoblash natijalari shuni ko'rsatadiki, Avogadro dasturida betulin kislotaning hosil bo'lishi issiqlik energiyasi Chemical metodida optimizatsiya qilinganida maksimal qiymatga ega bo'ldi va MMFF94 hamda MMFF94s metodlarida optimizatsiya qilinganida esa bir xil minimal qiymatga ega bo'ldi. Demak, betulin kislotasining uchun energetik parametr hisoblashda empirik hisoblash usullaridan MMFF94 va MMFF94s metodi samarali ekan. HyperChem dasturidagi hisoblash natijalari shuni ko'rsatdiki, Betulin kislotasining hosil bo'lishi issiqlik energiyasi BIO+(CHARMM) metodida optimizatsiya qilinganida maksimal qiymatga ega bo'ldi va OPLS metodida optimizatsiya qilinganida esa minimal qiymatga ega bo'lishi kuzatildi. Demak, betulin moddasining energetik parametrini hisoblashda BIO+(CHARMM) metodi samarali ekanligini ko'rish mumkin.



2-rasm. Betulin kislotasining turli metodlarda hisoblangan hosil bo'lish energiyalari

Keyingi ishlarimizda betulin kislotasining geometrik parametrlarini hisoblash maqsadida Avogadro dasturining 5 ta usulida (Chemical, MMFF94, MMFF94s, UFF, GAFF) molekula tarkibidagi kimyoviy bog'larning real uzunliklari hisoblashlarni amalga oshirdik. Natijalar 2-jadvalda keltirilgan.

2-jadval

Betulin kislotasining Avogadro dasturi yordamida olingan real bog' uzunliklari (Å)

T/r	Bog'lar	Chemical	MMFF94	MMFF94s	UFF	GAFF
1.	C1-C2	1.536	1.536	1.536	1.536	1.536
2.	C1-C6	1.536	1.536	1.536	1.536	1.536
3.	C1-H34	1.098	1.098	1.098	1.098	1.098
4.	C1-H35	1.096	1.096	1.096	1.096	1.096
5.	C2-C3	1.567	1.567	1.567	1.567	1.567
6.	C2-O22	1.427	1.427	1.427	1.427	1.427

7.	C2-C10	1.099	1.099	1.099	1.099	1.099
8.	C10-H60	1.569	1.569	1.569	1.569	1.569
9.	C3-C4	1.557	1.557	1.557	1.557	1.557
10.	C54-C5	1.539	1.539	1.539	1.539	1.539
11.	C5-C6	1.568	1.568	1.568	1.568	1.568
12.	C6-C7	1.542	1.542	1.542	1.542	1.542
13.	C7-C8	1.087	1.087	1.087	1.087	1.087
14.	C2-H36	1.542	1.542	1.542	1.542	1.542
15.	C8-C9	1.580	1.580	1.580	1.580	1.580
16.	C9-C10	1.561	1.561	1.561	1.562	1.561
17.	C5-C10	1.096	1.096	1.096	1.096	1.096
18.	C4-H37	1.096	1.096	1.096	1.096	1.096
19.	C6-H38	1.560	1.560	1.560	1.560	1.560
20.	C9-C11	1.094	1.094	1.094	1.094	1.094
21.	C6-H39	1.096	1.096	1.096	1.096	1.096
22.	C7-H40	1.567	1.566	1.567	1.567	1.567
23.	C11-C12	1.098	1.098	1.098	1.098	1.098
24.	C7-H41	1.097	1.097	1.097	1.097	1.097
25.	C8-H42	1.591	1.591	1.591	1.591	1.591
26.	C12-C13	1.642	1.642	1.642	1.642	1.642
27.	C13-C14	1.556	1.556	1.556	1.556	1.556
28.	C14-C10	1.546	1.546	1.546	1.546	1.546
29.	C11-C15	1.101	1.101	1.101	1.101	1.101
30.	C8-H43	1.566	1.566	1.566	1.566	1.566
31.	C15-C16	1.558	1.558	1.558	1.558	1.558
32.	C16-C17	1.567	1.567	1.567	1.567	1.567
33.	C17-C18	1.53/	1.537	1.537	1.537	1.537
34.	C18-C12	1.541	1.541	1.541	1.541	1.541
35.	C17-C19	1.097	1.097	1.097	1.097	1.097
36.	C10-H44	1.557	1.557	1.557	1.557	1.557
37.	C12-C20	1.095	1.095	1.095	1.095	1.095
38.	C12-H45	1.097	1.097	1.097	1.097	1.097
39.	C13-H46	1.095	1.095	1.095	1.095	1.095
40.	C13-H47	1.094	1.094	1.094	1.094	1.094
41.	C14-H47	1.556	1.556	1.556	1.556	1.556
42.	C14-H48	1.097	1.097	1.097	1.097	1.097
43.	C20-C21	1.096	1.096	1.096	1.096	1.096
44.	C14-H49	1.551	1.551	1.551	1.551	1.551
45.	C15-H50	1.096	1.096	1.096	1.096	1.096
46.	C15-H51	1.097	1.097	1.097	1.097	1.097
47.	C16-H52	1.536	1.536	1.536	1.536	1.536
48.	C3-C23	1.544	1.544	1.544	1.544	1.544
49.	C3-C24	1.533	1.533	1.533	1.533	1.533
50.	C5-C26	1.539	1.539	1.539	1.539	1.539
51.	C16-H53	1.106	1.106	1.106	1.106	1.106
52.	C5-C26	1.545	1.545	1.545	1.545	1.545
53.	C18-H54	1.095	1.095	1.095	1.095	1.095
54.	C19-H55	1.098	1.098	1.098	1.098	1.098
55.	C19-H56	1.554	1.554	1.554	1.554	1.554
56.	C20-H57	1.096	1.096	1.096	1.096	1.096
57.	C9-C27	1.097	1.097	1.097	1.097	1.097
58.	C20-H58	1.521	1.521	1.521	1.521	1.521

59.	O30-C28	1.097	1.097	1.097	1.097	1.097
60.	C21-H59	0.971	0.9710	0.971	0.97	0.971
61.	C23-H61	1.095	1.095	1.095	1.095	1.095
62.	C23-H62	1.095	1.095	1.095	1.095	1.095
63.	C23-H63	1.096	1.096	1.096	1.096	1.096
64.	C24-H64	1.090	1.090	1.090	1.090	1.090
65.	C24-H65	1.094	1.094	1.094	1.094	1.094
66.	C24-H66	1.097	1.097	1.097	1.097	1.097
67.	C25-H67	1.095	1.095	1.095	1.095	1.095
68.	C25-H68	1.088	1.088	1.088	1.088	1.088
69.	C25-H69	1.095	1.095	1.095	1.095	1.095
70.	C26-H70	1.088	1.088	1.088	1.088	1.088
71.	C26-H71	1.096	1.096	1.096	1.096	1.096
72.	O26-H72	1.094	1.094	1.094	1.094	1.094
73.	C27-H73	1.090	1.090	1.090	1.090	1.090
74.	C27-H74	1.096	1.096	1.096	1.096	1.096
75.	O30-C28	1.083	1.083	1.083	1.083	1.083
76.	C28-O29	1.350	1.350	1.350	1.350	1.350
77.	C28-O29	1.219	1.219	1.219	1.219	1.219
78.	C31-C33	0.980	0.9800	0.980	0.98	0.980
79.	C31-C21	1.344	1.344	1.344	1.344	1.344
80.	C33-H80	1.509	1.509	1.509	1.509	1.509
81.	C27-H75	1.087	1.087	1.087	1.087	1.087
82.	C30-H81	1.083	1.083	1.083	1.083	1.083
83	C31-H81	1.095	1.095	1.095	1.095	1.099

Betulinning ideal va real bog‘ uzunliklari nazariy MM usuli bilan o‘rganilganda empirik usul ning 5 ta metodida sezilarli farqlar kuzatilmadi.

1-jadval natijalaridan ko‘rinib turibdiki, Avogadro dasturida Chemical metodida hisoblangan energiya maksimal qiymatga ega bo‘ldi, MMFF94 va MMFF94s metodlarida esa barqaror natijalar kuzatildi. UFF metodida juda yuqori qiymat qayd etilishi ushbu metodning betulin kislotasi uchun aniq emasligini ko‘rsatadi. HyperChem dasturidagi hisoblashlarda BIO+(CHARMM) metodining yuqori energiya qiymati qayd etilgan, bu esa ushbu metod molekulaning ichki kuch maydonlarini yanada real ifodalashini ko‘rsatadi. ChemOffice dasturida esa MM2 metodida juda past energiya qiymati kuzatildi, bu esa hisoblashlarning molekulyar mexanik asoslari etarlicha mos kelmasligidan dalolat beradi. 2-jadvalda keltirilgan natijalardan ko‘rinadiki, bog‘ uzunliklarida sezilarli farqlar yo‘q. Bu Avogadro dasturida qo‘llanilgan kuch maydonlari betulin kislotasining geometrik barqarorligini yaxshi ifodalaydi. Grafiklarda ham ko‘rinadiki, hosil bo‘lish energiyalari turli metodlarda sezilarli darajada farq qiladi. Bu holatda metod tanlovi yakuniy natijalarga sezilarli ta’sir ko‘rsatadi.

XULOSA

O‘tkazilgan nazariy va eksperimental izlanishlar shuni ko‘rsatadiki, betulin kislotasining energetik parametrlarini aniqlashda turli metodlar qo‘llanganda sezilarli tafovutlar yuzaga keladi. Avogadro dasturida MMFF94 va MMFF94s metodlari optimal natijalarni ko‘rsatdi, HyperChem dasturida esa BIO+(CHARMM) metodining samaradorligi yuqori bo‘ldi. DFT va MD hisoblari betulin kislotasining oqsillar va fermentlarga bog‘lanish jarayonida barqaror komplekslar hosil qilishini tasdiqladi. Ushbu natijalar betulin kislotasi asosida yangi farmatsevtik preparatlar va nanokompozit materiallar yaratishda nazariy asos bo‘lib xizmat qiladi.

ADABIYOTLAR RO‘YXATI

1. Yu, P., Cao, W., & Wang, Y. (2024). Dynamics simulation and *in vitro* studies of betulinic acid derivative with liver X receptor. *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, 42*(13), 7014–7023. https://doi.org/10.1080/07391102.2023.2239924

2. Chen, S., Lin, B., Gu, J., et al. (2022). Binding interaction of betulinic acid to α-glucosidase and its alleviation on postprandial hyperglycemia. *Molecules, 27*(8), 2517. https://doi.org/10.3390/molecules27082517

3. Salau, V. F., Erukainure, O. L., Aljoundi, A., et al. (2024). Exploring the inhibitory action of betulinic acid on key digestive enzymes linked to diabetes via *in vitro* and computational models: Approaches to anti-diabetic mechanisms. *SAR and QSAR in Environmental Research, 35*(5), 411–432. https://doi.org/10.1080/1062936X.2024.2352729

4. Poorsargol, M., & Setayesh-Mehr, Z. (2022). Betulinic acid and 3-O-acetyl-betulinic acid interactions with external and internal surface of boron-nitride nanotubes: A DFT and MD investigation. *Computational and Theoretical Chemistry, 1213,* 113738. https://doi.org/10.1016/j.comptc.2022.113738

5. Dangroo, N. A., Moussa, Z., Alluhaibi, M. S., et al. (2025). Novel C-3 and C-20 derived analogs of betulinic acid as potent cytotoxic agents: Design, synthesis, *in vitro* and *in silico* studies. *RSC Advances, 15,* 15164–15177. https://doi.org/10.1039/D5RA01038A