

2,5-DIMERKAPTO-1,3,4-TIADIAZOLNI GIDRAZINLI KOMPLEKSINI BIOLOGIK FAOLLIGINI IN SILICO USULLAR YORDAMIDA BAHOLASH

<https://doi.org/10.70728/conf.edu.v3.i4.018>

¹Raxmatullayeva O.U., ³Jaloliddinov F.Y., ¹Babayev B.N.,
^{2,4}Kurbannazarova R.SH.,

¹O'zbekiston Milliy universiteti, Kimyo fakulteti,
Tabiiy birikmalar va amaliy kimyo kafedrası

²O'zbekiston Milliy universiteti huzuridagi Biofizika va biokimyo instituti

³O'zRFA akademik O.S. Sodiqov nomidagi Bioorganik kimyo instituti ⁴O'zbekiston Milliy universiteti, Biologiya fakulteti, biofizika kafedrası

Annotatsiya: Ushbu ishda 2,2'-((1,3,4-tiadiazol-2,5-diyil)bis(sulfandiyil)) di(atsetogidrazid) birikmasining biologik faolligi kompyuter modellashtirish usullari yordamida o'rganildi. PASS Online natijalari moddaning serebral antiishemik va sitoprotektor xususiyatlarini ko'rsatdi. Molekulyar dokking tahlillari PTP1B oqsili bilan yuqori bog'lanish energiyasini (-7.7 kkal/mol) aniqladi, bu esa birikmaning diabetga qarshi potentsialini tasdiqlaydi.

Kalit so'zlar: 1,3,4-tiadiazol, molekulyar dokking, PASS Online, PTP1B, in silico, biologik faollik.

Kirish

Bugungi kunda farmatsevtika sohasida 1,3,4-tiadiazol halqasi saqlagan birikmalar o'zining keng ko'lamli farmakologik xususiyatlari bilan ajralib turadi. Ushbu tizim asosida sintez qilingan hosilalarning ta'sir mexanizmini zamonaviy kompyuter texnologiyalari (in silico) orqali o'rganish yangi dori vositalarini yaratish vaqtini va xarajatlarini sezilarli darajada qisqartiradi. 1,3,4-tiadiazol hosilasi bo'lgan yangi birikmaning biologik faollik spektrlari Pass Online dasturi va molekulyar dokking usullari yordamida nazariy tahlil qilindi. Tadqiqot natijalari birikmaning qandli diabet, nevrologik kasalliklar va saratonga qarshi potentsial dori vositasi bo'lishi mumkinligini ko'rsatdi.

Tadqiqot ob'ekti va metodikasi: Tadqiqot ob'ekti sifatida 2,2'-((1,3,4-tiadiazol -2,5-diyil) bis(sulfandiyil)) di(atsetogidrazid) ($C_6H_{10}N_6O_2S_3$) birikmasi tanlandi. Birikmaning ehtimoliy faolligi Pass Online dasturi yordamida, oqsillar bilan bog'lanish energiyasi esa Vina Xol ko'rsatkichlari asosida molekulyar dokking usulida o'rganildi. Pass Online tahlillariga ko'ra, o'rganilayotgan modda uchun quyidagi yuqori faollik ko'rsatkichlari aniqlandi:

- *Antiischemic, cerebral* (Pa = 0.863);
- *Beta-Lysine 5,6-aminomutase inhibitor* (Pa = 0.845);
- *Celiac disease treatment* (Pa = 0.829).

Natijalar va ularning muhokamasi: Molekulyar dokking tahlillari natijasida ligantning turli terapevtik nishon oqsillar bilan kuchli bog‘lanishi qayd etildi. Eng yuqori natijalar quyidagicha shakllandi:

1. PTP1B (6o0f) oqsili (Human protein tyrosine phosphatase 1B) bilan bog‘lanish energiyasi -7.7 kcal/molni tashkil etdi. Bu natija moddaning qandli diabetni davolashda samarali ekanligini bildiradi.
2. Kv1.2-Kv2.1 (2r9r) kaliy kanallari bilan bog‘lanish -7.4 kcal/molga teng bo‘lib, bu epilepsiya va aritmiya kasalliklarida muhim ahamiyat kasat qiladi.
3. HSP90 (6hub) oqsili bilan -7.0 kcal/mol qiymatdagi bog‘lanish aniqlandi, bu esa birikmaning onkologik kasalliklarda o‘sma hujayralari o‘sishini to‘xtatish xususiyatini ko‘rsatadi.

Xulosa: Olingan nazariy natijalar 2,2'-((1,3,4-tiadiazol-2,5-diyil) bis(sulfandiyil)) di(atsetogidrazid) birikmasining ko‘p qirrali biologik faollikka ega ekanligini tasdiqlaydi. Ayniqsa, PTP1B va kaliy kanallariga nisbatan namoyon bo‘lgan yuqori affinlik birikmani qandli diabet va neyrodegenerativ kasalliklarga qarshi dori vositasi sifatida chuqur o‘rganish uchun asos bo‘lib xizmat qiladi.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR:

1. Filimonov D.A. et al. (2014). PASS Online: predicting biological activity spectra for chemical compounds. Bioinformatics.
2. Trott O., Olson A.J. (2010). AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking. Journal of Computational Chemistry.
3. Jaloliddinov F.Y. va boshqalar. (2025). Tiadiazol hosilalarining sintezi va tahlili. O‘zMU xabarlarlari.