

20-May, 2025-yil

**BETULIN KISLOTASINING ENERGETIK PARAMETRLARINI
EKSPERIMENTAL O‘RGANISH**

Sh.Sh.Turg‘unboyev

FarDU kimyo kafedrasi dotsenti, PhD

Y.I.Jurayev

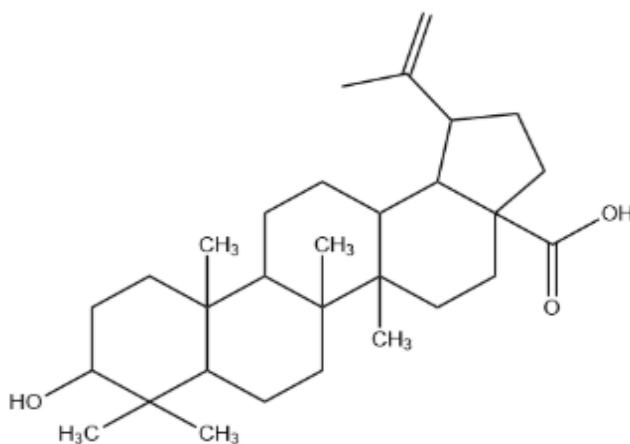
FarDU talabasi

Annotatsiya: Mazkur maqolada yuqori biologik faolliklarga ega bo‘lgan birikma betulin kislotasining tuzilishi va energetik parametrlarini turli dasturlardan foydalanib eksperimental hisoblash natijalari bayon etilgan.

Kalit so‘zlar: betulin kislota, hisoblashlar, energetik parametrlar, metodlar.

Betulin kislotasi tabiiy kelib chiqishga ega bo‘lgan pentasiklik triterpenoid birikma bo‘lib, asosan oq qayin qobig‘idan ajratib olinadi. Ushbu birikma saraton hujayralariga qarshi, yallig‘lanishga qarshi, antioksidantlik, antibakterial va zamburug‘larga qarshi yuqori biologik faolliklarni namoyon etganligi tufayli turli dori vositalarining tarkibiy qismi sifatida keng o‘rganilmoqda [1].

Betulin kislotaning asosiy skeleti lupan tipidagi besh halqali struktura asosida qurilgan bo‘lib, uning tarkibida quyidagi funksional guruhlar: 3-holatda –OH (gidroksil) guruhi, 28-holatda –COOH (karboksil) guruhi, 20(29)-holatda –C=C (juft bog‘) mavjud bo‘lib, molekulyar formulasi: $C_{30}H_{48}O_3$ hisoblanadi (1-rasm).



1-rasm. Betulin kislota

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. Har bir metodda olingan natijalari quyidagi jadvallarda keltirilgan.

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

HyperChem				Avogadro				Chem Office
<i>MM+</i>	<i>Amber</i>	<i>BIO+ CHAR MM</i>	<i>OPLS</i>	<i>Chemical</i>	<i>MMFF94</i>	<i>MMFF94s</i>	<i>UFF</i>	<i>MM2</i>
260.4	260.466	316.29	240.98	721.43	695.198	695.159	1606.06	104.849

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 triterpenoidining hosil bo‘lish 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 ekanligi aniqlandi.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR:

1. Ghaffari Moghaddam, M., Bin H. Ahmad, F. and Samzadeh-Kermani, A. (2012) Biological Activity of Betulinic Acid: A Review. *Pharmacology & Pharmacy*, 3, 119-123. doi: [10.4236/pp.2012.32018](https://doi.org/10.4236/pp.2012.32018).