

## ЯНГИ ДОРИ МОДДАЛАРИ СИНТЕЗИДА "IN SILICO" УСУЛИНИНГ ҚЎЛЛАНИЛИШИ

**Баракаев Л.Д.<sup>1</sup>**

**Шарипов А.Т.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Osiyo Xalqaro Universiteti, Buxoro shahri, O'zbekiston Respublikasi

<sup>2</sup>Toshkent farmatsevtika instituti, Toshkent shahri, O'zbekiston Respublikasi

e-mail: [buk\\_lazizbekk@mail.ru](mailto:buk_lazizbekk@mail.ru); tel: +998914161525

<https://doi.org/10.5281/zenodo.20390638>

**Долзарблиги.** Замоनावий фармацевтик кимёнинг устувор вазифаларидан бири - юқори биологик фаолликка эга ва кам токсик бўлган оригинал дори воситаларини яратиш жараёнини тезлаштириш ҳамда иқтисодий жиҳатдан оптималлаштиришдир. "Классик" усуллар ёрдамида янги дори молекуласини кашф этиш ва бозорга олиб чиқиш ўртача 10-12 йил вақт ҳамда миллиардлаб АҚШ доллар харажатларни талаб этади.

"In silico" усуллари миллионлаб потенциал молекулалар ичидан энг истиқболли ва хавфсиз "лиганд" (номзод модда)ларни саралаб олиш, таъсир механизмини молекуляр даражада башорат қилиш имконини беради.

**Тадқиқот мақсади.** Янги дори моддаларини мақсадли кимёвий синтез қилиш ва скрининг жараёнларида "In silico" (молекуляр доккинг, QSAR ва ADMET таҳлили) усуллариининг замонавий имкониятлари, алгоритмлари ва фармацевтик тадқиқотлардаги аҳамиятини назарий ҳамда услубий жиҳатдан таҳлил қилиш ва баҳолаш.

**Материал ва усуллар.** Тадқиқот давомида халқаро илмий маълумотлар базалари (PubMed, Scopus, Web of Science) ва фармацевтик компьютер дастурларининг имкониятлари ўрганилди. "In silico" тадқиқотларини ўтказишда асосий материал сифатида қуйидаги тизимлар ва базалар таҳлил қилинди:

**1.Кимёвий тузилишлар базаси:** Потенциал дори молекулаларининг 2D ва 3D тузилишларини олиш учун **PubChem** ва **ChemSpider** базаларидан фойдаланилди. Молекулаларни оптималлаштириш **ChemDraw** ва **HyperChem** дастурларида амалга оширилди.

**2.Биологик нишонлар базаси:** Касаллик чақирувчи оқсиллар, ферментлар ва рецепторларнинг уч ўлчамли кристалл тузилишлари халқаро **Protein Data Bank (PDB)** базасидан юклаб олинди.

**3.Молекуляр доккинг (Molecular Docking):** Оқсил ва лиганд ўртасидаги фазовий ва энергетик таъсирлашувни ўрганиш учун **AutoDock Vina**, **ArgusLab** ва **Discovery Studio Visualizer** дастурий таъминотлари қўлланилди.

**4.ADMET ва QSAR прогнозлаш:** Моддаларнинг фармакокинетик хусусиятлари (абсорбция, тақсимланиш, метаболизм, экскреция) ва токсиклик профилини аниқлаш мақсадида **SwissADME**, **pkCSM** ва **PASS Online** веб-серверларидан фойдаланилди.

**Натижалар ва уларнинг муҳокамаси.** "In silico" усули дори воситаларини яратишнинг дастлабки босқичида қуйидаги учта асосий йўналишда ҳал қилувчи рол ўйнайди:

**1. Виртуал скрининг (Virtual Screening).****2. Молекуляр доккинг ва дизайн.****3. Фармакокинетика ва хавфсизликни баҳолаш (ADMET).**

Хулоса. "In silico" компьютер моделлаштириш усуллари замонавий фармацевтик кимёда янги дори воситаларини мақсадли синтез қилишнинг ажралмас ва энг самарали воситаси ҳисобланади. Ушбу ёндашув Осиё Ҳалқаро Институти илмий-тадқиқот ишларида маҳаллий хом ашёлар ва синтетик бирикмалар асосида кам харажат ва юқори аниқлик билан саратонга қарши ва бошқа янги авлод дори воситаларини лойиҳалашда кенг истиқболларга эга. Институтиимиз лабораторияларида кимёвий синтез жараёнларидан олдин виртуал скрининг ва молекуляр доккинг босқичларини мажбурий жорий этиш маҳаллий фармацевтика фанининг илмий салоҳиятини халқаро даражага кўтаришга хизмат қилади.