

L - KARNITIN BILAN GLITSIRRIZIN KISLOTANING SUPRAMOLEKULAR KOMPLEKSI KRISTALLARI

Turg'unova Sabohat Ilhomjon qizi

Toshkent tibbiyot akademiyasi

Chirchiq filiali asisstant o'qituvchisi

Respublikamizda so'ngi yillarda dorivor o'simliklar tabiiy resurslardan oqilona foydalanish, ularni muhofaza qilish, yetishtiriladigan plantatsiyalar tashkil etish va qayta ishlash borasida izchil islohatlar amalga oshirilmoqda. Shunday dorivor o'simliklardan biri shirinmiya o'simligi (*Glycyrrhiza glabra* L). Respublikamizda keng tarqalgan va sanoat miqqiyosida qayta ishlanib undan quyuuq ekstrakt, texnik glitsirrizin kislotasi ishlab chiqariladi. Ma'lumki uni asosiy ta'sir etuvchi komponentlaridan biri 18 β -H Glitsirrizin kislotasi xisoblanadi va uning asosida qator kompleks dori vositalari ishlab chiqarilib tibbiyotda keng qo'llanilmoqda. Jumladan virusga qarshi, jigar kasalliklariga qarshi (gepatit B,S) allergik kasalliklar va h k.

Jahoning nufuzli ilmiy tekshirish markazlarida Glitsirrizin kislotani noyob fizik-kimyoviy va biologik xususiyatlarini inobatga olgan holda uni asosida supramolekulyar birikmalar olish va biologik faolligini tadqiq etish bo'yicha qator izlanishlar olib borilmoqda. Izlanishlar natijasida olingan kompleks birikmalar tarkibidagi mexmon molekulasi xos bo'lgan ayrim salbiy ta'sirlar kamayishi yoki umuman bartaraf etilishi, samarali dozani kamayishi energetik ta'sir etishi mumkin. Bugungi farmatsevtik kimyoda tabiiy biologik faol birikmalar asosida yangi, xavfsiz, salbiy ta'siri bo'lmagan, kam dozali, yuqori samarali dori vositalari yaratishga katta e'tibor qaratilmoqda. Biologik faol moddalar tirik organizm faoliyati va turli metabolizm jarayonlarda ishtirok etadi hamda ularni muvofiqlashtiradi.

Dorivor o'simliklardan biri bo'lgan shirinmiya o'simligidan katta miqdorda Glitsirrizin kislotasi olinadi. Glitsirrizin kislotasi biologik aktivlikka ega bo'lib yo'talga, yallig'lanishga, allergiyaga qarshi dori vositasi sifatida ishlatiladi. Shundan kelib chiqib Glitsirrizin kislotasi asosida yangi hosilalarini olish, olingan birikmalar tuzilishini, biologik aktivligini aniqlash va ulardan dori vositalarini yaratishda ORCA (kvant-kimyoviy hisob kitoblar metodlari uchun programma paket) kompyuter dasturlaridan foydalaniladi



L - Karnitin bilan Glitsirizin kislotaning supramolekulyar kompleksi kristallarining rentgen strukturaviy tahlili

GK ning biologik faolligi va fizik-kimyoviy xususiyatlariga, uning tuzlari va komplekslariga katta qiziqish bo'lishiga qaramay, ushbu tabiiy birikma haqida strukturaviy ma'lumotlar juda kam, chunki bu birikmaning monokristallini olish juda qiyin bo'lib suvda GK va uning tuzlari ko'pincha kolloid eritmalar hosil qiladi. Biroq, bu tadqiqotlar eritmalar va gellarda GKning mumkin bo'lgan supramolekulyar tashkil etilishini ko'rib chiqish imkoniyatini ochadi. Mezbonning terpen va disaxarid qismlarida joylashgan karboksilik guruhlarni to'ldiruvchi karboksilik guruhga ega bo'lgan Glitsirizin kislotani monoammoniyli tuzini karnitin bilan birgalikda kristallashtirishga harakat qilindi.

Suvda kristallanish uchun zarur bo'lgan konsentratsiyalar oralig'ida triterpen saponinlarining ko'pchiligi, shu jumladan GK va uning monoammoniy tuzi kolloid suspenziyalar yoki jellar hosil qiladi va shuning uchun ularning kristallanishi oson ish emas. Kristallanish uchun Glitsirizin kislotani monoammoniyli tuzi va karnitin nisbati 2:1 tanlanadi. Kristallanish muhiti sifatida suv va sirka kislotasi aralashmasi tanlangan. Kristallanish termostatda 40 ° C da sekin bug'lanish orqali rentgen nurlari diffraksiyasini o'rganish uchun mos bo'lgan yagona kristallar paydo bo'lguncha amalga oshiriladi.

Cho'kmadagi kristallar ignasimon ko'rinishga ega edi. Kristall panjara parametrlari: $a=10,520(2)\text{\AA}$, $b=11,254(3)\text{\AA}$, $c=51,73(3)\text{\AA}$, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$, $V= 6118(7)\text{\AA}^3$, fazo guruhi – P212121, ortoromb singoniyasi, $Z=4$. $D_x= 1,149 \text{ Mg/m}^3$.

Kembrij kristallografik markazi ma'lumotlari yordamida berilgan hujayra parametrlari bilan tuzilmalarni qidirish glitsirizin kislotasi va uning tuzlarining 4 ta tuzilishi mavjudligini ko'rsatadi. Glitsirizin kislota va para-aminobenzoy kislotasi monoammoniy tuzi kristalining birlik hujayra parametrlari biznikiga to'liq mos keldi. To'liq rentgen strukturasi tahlil qilish va kristallimizning to'liq aks ettirish majmuasini to'plash mumkin emas edi, chunki kristall uni qoldiq eritmasidan chiqarilganda va aks ettirish uchun yig'ila boshlaganida 5-6 daqiqa ichida buzilib ketardi.

Biroq, deyarli bir xil hujayra parametrlari, mehmon komponentining yaqin o'lchami (para-aminobenzoy kislotasi va karnitin) bizga izomorfizm prinsipi asosida komplekslarning tarkibiy tahlilini o'tkazishga imkon beradi.

Glitsirizin kislota va uning tuzlari ishtirokidagi barcha kristall tuzilmalar o'xshash kristalli qadoqlarga ega bo'lganligi sababli, bu supramolekulyar kompleks GC:Car



GKMT-PABK majmuasi bilan deyarli bir xil. Birlik hujayraning mustaqil qismida bitta GKMT mezbon molekulasini, bitta karnitin molekulasini, ikkita sirka kislota molekulasini va ikkita suv molekulasini mavjud.

L shaklidagi GK molekullari yoki GK monoanionlari kristalda o'zgaruvchan gidrofilik va gidrofobik hududlarning xarakterli motivini hosil qiladi, buning natijasida GK ning vodorod aloqalari bilan kristalli o'rashini hosil qiladi. Ushbu shakllanishlarni ikki o'lchovli shakar platformasi va har ikki tomondan chiqadigan aglikon bo'laklaridan tashkil topgan gidrofilik ichki qismdan iborat ikki qatlam sifatida ko'rish mumkin.

Natijada, GK ning karnitin bilan supramolekulyar tuzilishi gidrofobik va gidrofilik mintaqalarning almashinishi bilan tavsiflanadi. Bu GK misellari va ularning komplekslarini dori molekullari bilan modellashtirish uchun mustahkam asos bo'lishi mumkin.

Turli materiallar va jarayonlarning fizik va kimyoviy xususiyatlarini nazariy tadqiqotlari va kompyuter modellashtirish alohida atomlar va molekullarning xattixarakatlarini mikroskopik tadqiqotlariga va bir butun qarab ularni fenomenologik sifatida materiallarni makroskopik o'rganishga bo'linadi. Agar birinchisiga kvant mexanik va molekulyar dinamik usullari kirsa, ikkinchisiga Lanjeven va boshqalarning usullari kiradi. Xartri-Fok nazariyasi va Xoenberg-Kon teoremasiga asoslangan usullarga bo'lingan kvant mexanik yondashuvi materiallar tuzilishi va uning elektron tuzilishining fazoviy konfiguratsiyasini qurish imkonini beradi.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. Dyadin Yu.A., Udachin K.A., Bondaryuk I.V. Soyedineniya vklyucheniya. Novosibirsk: Izd-vo Novosib. gos. un-ta, 1988. 92 s.
2. Zevatskiy Yu.E. Новый метод расчёта физико-химических характеристик органических соединений: автореф. дис. ... д-ра хим. наук. Санкт-Петербург, 2010.
3. Gadomskiy T.Ya. i dr. I Mejdunarodnaya molodejnaya konferensiya-shkola po sintezu i stroyeniyu supramolekulyarnyx kompleksov. Kazan, Rossiya. 27-31 avgusta 2002.
4. Rzhepa H.S., Yi M., J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2, 1990, 943. 6. Kallies B., Mitzner R., J. Mol. Model., 1995, 1, 68.
5. Klark T. Kompyuternaya ximiya. M.: Mir, 1990. 383 s.
6. Zubkov V.A., Kolegov B.I., Birshteyn T.M. Uspexi ximii. 1983. T.LII, vьp.7. S. 1057–1085.

