Journal of Chemistry of Goods and Traditional Medicine

J Chem Good Trad Med, Volume 4, Issue 2, 2025 Chemistry of Goods

USNIK KISLOTANING REAKTIVLIGI VA BARQARORLIGI: KVANT KIMYOVIY HISOBLASHLAR

Gulnozaxon Islom qizi Qoraboyeva
Farg'ona davlat universiteti Kimyo kafedrasi Tovarlar kimyosi ixtisosligi tayanch doktoranti
https://orcid.org/0009-0003-7549-3882

Iqboljon Jamolovich Jalolov
Farg‘ona davlat universiteti Kimyo kafedrasi professori, kimyo fanlari doktori
https://orcid.org/0009-0003-3530-5699

Sevara Baxtiyorovna Kazimova
Farg‘ona jamoat salomatligi tibbiyot instituti Farg‘ona Jamoat Salomatligi tibbiyot instituti Epidemiologiya yo’nalishi ordinatori
https://orcid.org/0009-0007-1724-2056
E-mail: sevarakazimovab@gmail.com

DOI: https://doi.org/10.55475/jcgtm/vol4.iss2.2025.479

Kalit so'zlar:
usnik kislota, poliketid, kvant kimyo, Gaussian 09, DFT, molekulyar modellashtirish

Annotatsiya

Ushbu ilmiy ishda usnik kislotaning molekulyar tuzilmasi, zaryad taqsimoti va bog‘ uzunliklari Gaussian 09 dasturi asosida noempirik kvant-kimyoviy usullar orqali o‘rganildi. Hisoblashlar DFT (Density Functional Theory) metodining B3LYP funksionalidan va 6-31G bazis to‘plamidan foydalanilgan holda amalga oshirildi. Molekulyar modellashtirishda yordamchi dasturlar sifatida Avogadro 1.2.0 va GaussView 6.0.16 dasturlari qo‘llanildi. Natijalarda molekulaning asosiy (ground state) holatdagi geometriyasi, atomlararo bog‘ uzunliklari va elektron zaryadlarining taqsimoti aniqlandi. Zaryad taqsimoti molekula ichida elektron zichligining tarqalishini tahlil qilish, reaktsion faollik markazlarini aniqlash va molekulaning elektrostatik potentsialini baholash imkonini berdi. Bog‘ uzunliklarining aniqlanishi esa molekulaning geometrik barqarorligini, bog‘larning mustahkamlik darajasini va kimyoviy reaktivligini bashorat qilishga yordam berdi. Olingan natijalar molekulalarning fazoviy xatti-harakatlarini, reaktivlik xususiyatlarini chuqur tahlil qilishga zamin yaratadi. Tadqiqot natijalari dori dizayni, materialshunoslik va kataliz sohalarida molekulyar darajadagi o‘zaro ta’sirlarni tushunish, shuningdek yangi biofaol birikmalarni modellashtirish uchun nazariy asos bo‘lib xizmat qiladi.

Havola uchun

Qoraboyeva, G. I. qizi, Jalolov, I. J., & Kazimova, S. B. USNIK KISLOTANING REAKTIVLIGI VA BARQARORLIGI: KVANT KIMYOVIY HISOBLASHLAR. Tovarlar Kimyosi Va Xalq Tabobati Jurnali, 4(2). https://doi.org/10.55475/jcgtm/vol4.iss2.2025.479

Kirish. Turli xil zamburug’ tolalari orasida suv o’tlari yoki siyanobakteriyalar joylashib, ular o’rtasida simbioz munosabatlar shakllanadi. Bundan tashqari, zamburug’lar va bakteriyalar birgalikda gibrid koloniyalar hosil qilishi mumkin. Bunday murakkab va o’zaro bog’langan hayot shakliga lishayniklar deyiladi [1][2]. Lishaynik ichidagi mikroorganizmlar tashqi qatlam — “korteks” yoki “teri”da joylashgan bo’lib, ular o’rtasida foydali mutualistik aloqalar mavjud [3][4][5][6][7]. Bugungi kunda lishayniklarning kimyoviy tarkibi va asniqsa lishaynik kislotalarini aniqlash, ajratib olish va xossalarini o’rganishga bo’lgan amaliy ishlar tadqiqotchilarda kata qiziqish uyg‘otmoqda.

Usnik kislotasi ($C_{18}H_{16}O_7$) — tabiiy kelib chiqishga ega bo‘lgan, lishayniklardan ajratib olingan poliketid strukturasidagi biologik faol modda [8] bo‘lib, uning antibakterial, antivirus, yallig‘lanishga qarshi va boshqa farmakologik faolligi ilmiy adabiyotlarda keng yoritilgan. Ammo uning fazoviy strukturasi va elektron xossalarini chuqur kvant-kimyoviy tahlil qilish zarurati hali ham dolzarb bo‘lib qolmoqda. Ayniqsa, molekuladagi bog‘ uzunliklari va zaryad taqsimotini aniqlash uning reaktivligi, biologik ta’siri va boshqa fizik-kimyoviy xususiyatlarini tushunishda muhim ahamiyatga ega.

Natija va muhokamalar. 2023-yil iyul oyida O‘zbekistonning tog‘li hududlaridan yig‘ilgan 1 kg miqdoridagi *Xanthoparmelia conspersa* lishaynigi namunasi mexanik iflosliklardan tozalandi. Namuna 40–50 °C dan oshmagan haroratda quritilib, kukun holiga keltirildi. Ekstraksiya uchun lishaynik kukuni shisha idishga solinib, ustidan 70% etanol quyildi (taxminiy nisbati 1:5 — 1 qism lishaynikga 5 qism erituvchi). Aralashma xona haroratida 48 soat davomida vaqti-vaqti bilan chayqatilgan holda tindirildi. So‘ngra ekstrakt avvalgina gazli dokadan, so‘ng filtr qog‘ozidan o‘tkazilib, lishaynik qoldiqlaridan tozalandi. Erituvchining ortiqcha miqdori bug‘lantirib olib tashlandi va natijada 1 g quruq ekstrakt olindi. Quruq qoldiqning bir qismi harakatlanuvchi faza — gemksanga eritilib, diqqat bilan sorbent ustki qatlamiga tomizildi. Sorbent sifatida silikagel ishlatildi. Kolonka (diametri 1,5–3 sm, uzunligi 30 sm) orqali avval gemksan, keyin esa xlorofrom o‘tkazildi. Chiqqan fraksiyalar probirkalarga yig‘ildi. Har bir fraksiyaning tozaligi yupqa qatlamli xromatografiya (TLC) usuli orqali tekshirildi. 365 nm to‘lqin uzunligidagi UF nurlanish ostida usnik kislotasi sariq-yashil florensensiya bilan ajralib turadi. Xlorofrom fraksiyalar yig‘ilib, ularga 10% li sirka kislotasining 10 tomchisi qo‘shildi. Natijada 2,5 g miqdorida och yashil-sariq cho‘kma hosil bo‘ldi. Hosil bo‘lgan cho‘kma distillangan suvda yuvilib, filtr qog‘ozda quritildi. TLC usulida usnik kislotasi standarti bilan taqqoslash asosida ushbu cho‘kma usnik kislotasi deb taxmin qilindi. Ajratib olingan usnik kislotasining barqarorligi, reaktivligi kabi xossalari kvant hisoblashlar bilan aniqlandi.

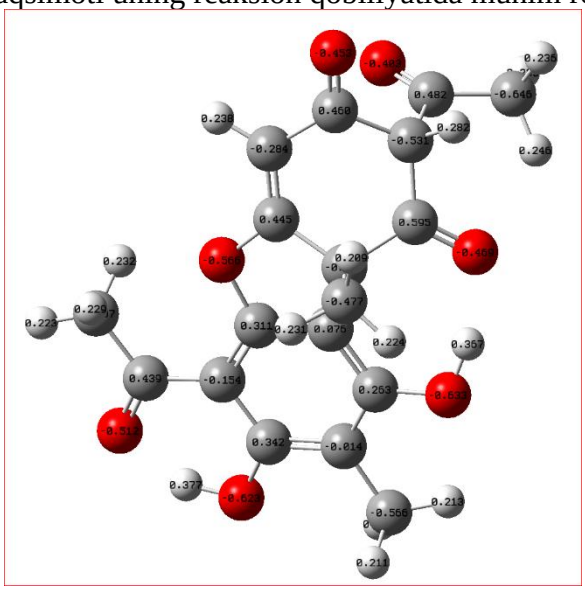
Bugungi kunda amaliyotda noempirik hisoblashlar uchun zamonaviy Gaussian dasturlarini qo‘llab yuqori darajadagi aniqlikga erishish mumkin. Gaussian– molekulyar modellashtirishning turli-tuman usullarini o‘zida mujassamlashtirgan molekulyar sistemalarning tuzilishi va xossalarini hisoblashga qaratilgan kompyuter dasturi. Bu dastur nobel mukofoti laureati Jon Popl va uning tadqiqot guruhi tomonidan yaratilgan bo‘lib, bugungi kunda ham yangilanib kelinmoqda. Dasturning foydalanishdan eng so‘nggisi Gaussian-09 hisoblanadi. Kvant mexanikasining fundamental qonunlariga asoslangan holda Gaussian molekulyar sistemaning gaz va kompleks holatlarida ham assosiy, ham qo`zg`algan holatlaridagi energiyasi, molekulyar tuzilishi va tebranish chastotlari, hamda bir qator molekula xossalari to‘g‘risida ma’lumot beradi.

Bunda hisoblash natijalari (Gaussian 09 dasturi paketida Ground state, DFT, Undestricted, B3LYP) metodi asosida 6-31G basis set (o’rnatmasi)da olib borildi. Yordamchi dasturlar sifatida Avogadro 1.2.0 va GaussView 6.0.16. dastur paketlaridan foydalanildi.

Bog’ uzunligi va zaryad taqsimoti. Hisoblash kimyosida bog’ uzunligi va zaryad taqsimoti molekulalarning tuzilishi, barqarorligi va reaktivligi haqida qimmatli ma'lumotlarni taqdim etadigan muhim molekulyar xususiyatlardir. Bu xususiyatlar odatda kvant mexanik hisob-kitoblar orqali olinadi va ular bir nechta muhim natijalarni beradi

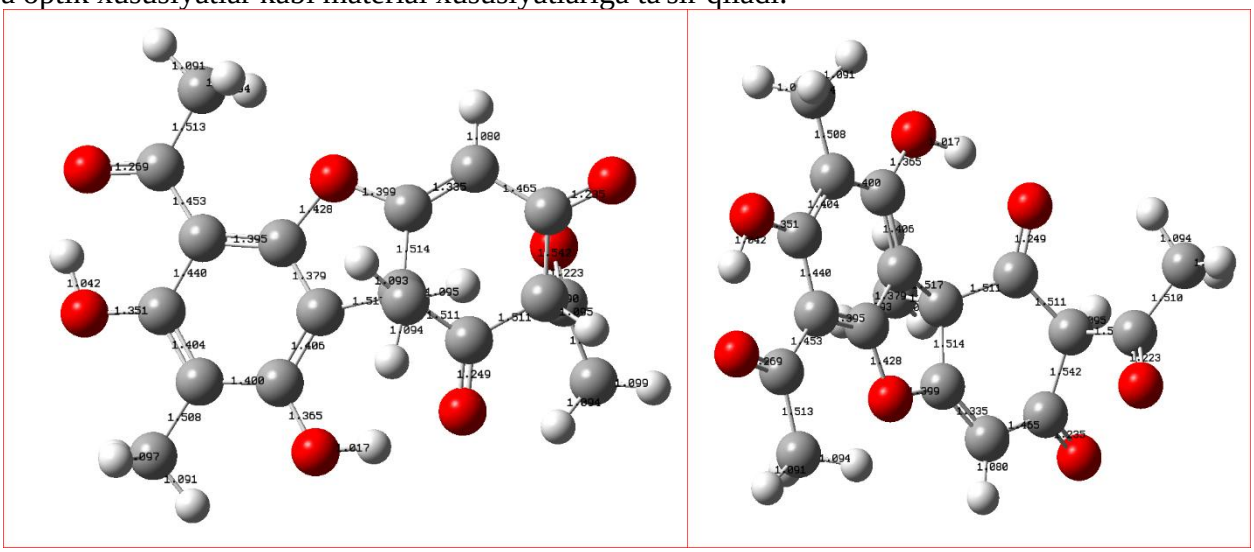
Bog'larning uzunligi molekuladagi atomlar orasidagi masofa bo'lib, ular molekulaning umumiy shakli va geometriyasini belgilaydi. Bog'lanish uzunligini bilish molekulaning gibridlanishini aniqlashga yordam beradi. Bu ma'lumotlar molekuladagi atomlarning uch o'lchovli (3D) joylashishini va uning xususiyatlarini tushunishda muhim ahamiyatga ega. Bog' uzunligi bog'lanish kuchi bilan bog'liq; qisqaroq bog'lanish uzunligi odatda kuchliroq bog’larni ko'rsatadi, uzunroq bog'lanish uzunligi esa zaifroq bog’larni anglatadi. Bog'lanish kuchlarini bilish molekulalarning barqarorligini va ularning kimyoviy reaktsiyalarga moyilligini bashorat qilishda juda muhimdir.

Molekuladagi zaryad taqsimoti uning atomlari atrofidagi elektronlarning taqsimlanishi bilan aniqlanadi. Zaryad taqsimotini hisoblash orqali hisoblash kimyosi molekulaning elektrostatik potentsial energiyasi haqida ma'lumot berishi mumkin. Ushbu ma'lumotlar molekulaning turli muhitlarda va kimyoviy reaktsiyalarda barqarorligi va xatti-harakatlarini baholashda juda muhimdir. Molekula ichidagi zaryad taqsimoti uning reaksion qobiliyatida muhim rol o'ynaydi.



Rasm-1. Usnik kislotaning zaryad taqsimoti

Zaryad taqsimotini tushunish reaktsiya mexanizmlarini bashorat qilishga va ba'zi reaktsiyalar nima uchun sodir bo'lishini tushunishga yordam beradi. Dori dizayni va materialshunoslik kabi sohalarda bog’ uzunligi va zaryad taqsimotini bilish molekulyar o'zaro ta'sirlarni tushunish uchun juda muhimdir. Ushbu o'zaro ta'sirlar molekulaning biologik faolligiga, maqsadli bog'lanishiga, kuch va optik xususiyatlar kabi material xususiyatlariga ta'sir qiladi.



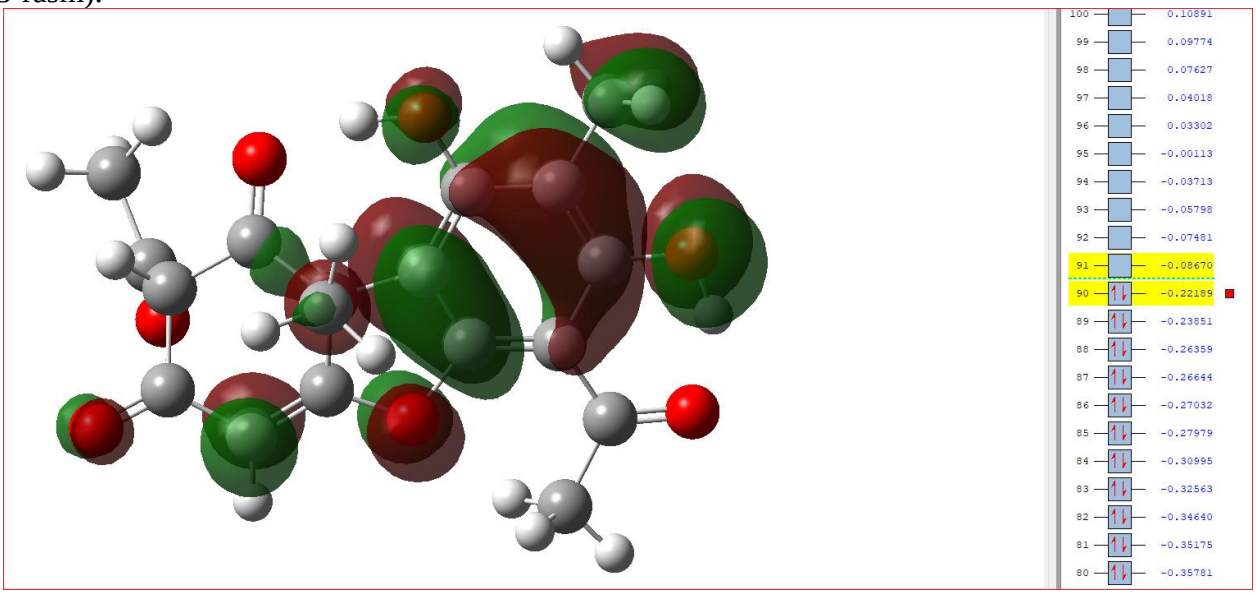
Rasm-2. Usnik kislotaning bog’ uzunliklari

Bundan kelib chiqadiki, Bog'larning uzunligi va zaryad taqsimoti hisoblash kimyosining asosiy parametrlari bo'lib, molekulalarning xatti-harakati va xususiyatlari haqida chuqur ma'lumot beradi. Bog'lanish uzunligini aniq aniqlash molekulyar geometriyalarni, reaktsiya mexanizmlarini va barqarorlikni bashorat qilishga yordam beradi. U o'ziga xos xususiyatlarga ega yangi molekulalarni loyihalash uchun juda muhim bo'lgan kimyoviy bog'lanishlarning tabiatini tushunishda hal qiluvchi rol o'ynaydi. Boshqa tomondan, zaryad taqsimotini tahlil qilish elektron zichligi, elektrostatik

potentsial va elektronga boy / taqchil hududlar haqida ma'lumot beradi, bu uni molekulyar o'zaro ta'sirlarni, reaktivlikni va murakkab tizimlarning elektron tuzilishini o'rganish uchun ajralmas vositaga aylantiradi.

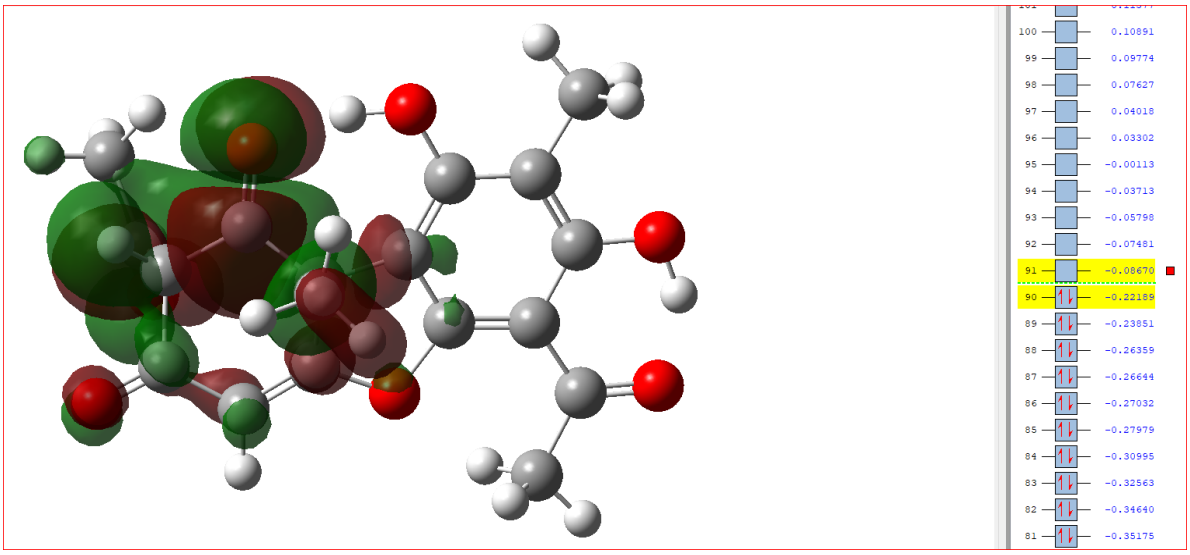
Bog' uzunligi va zaryad taqsimoti tahlillarining kombinatsiyasi tadqiqotchilarga molekulyar xatti-harakatlar haqida keng qamrovli tushunchaga ega bo'lish va turli sohalarda, jumladan, dori kashfiyoti, materialshunoslik va katalizda asosli qarorlar qabul qilish imkonini beradi.

HOMO va LUMO orbitallari. Hisoblash kimyosida HOMO va LUMO mos ravishda yuqori band bo'lgan molekulyar orbital va quyi bosh molekulyar orbitalni anglatadi (1 va 2-rasmlar). Ushbu orbitallar molekulalarning kimyoviy va fizik xususiyatlarini aniqlashda muhim rol o'ynaydi. HOMO elektronlarni o'z ichiga olgan eng yuqori energiya darajasiga ega orbitaldir. U molekuladagi eng erkin bog'langan elektronlarni ifodalaydi va elektron uzatish, nukleofil hujum va Lyuis kislota-asos o'zaro ta'siri kabi kimyoviy reaktsiyalarda ishtirok etadi. HOMO (Usnik kislotaning E_H=-0.22189 eV) energiyasi molekulaning ionlanish potentsialiga, reaktivligiga va barqarorligiga ta'sir qilishi mumkin (3-rasm).



Rasm-3. Usnik kislotasining HOMO qiymati

Boshqa tomondan, LUMO molekulada bo'sh bo'lgan eng past energiya darajasiga ega bo'lgan orbitaldir. U molekulaning elektronni qabul qilish qobiliyatini ifodalaydi va elektrofil hujum va radikal reaktsiyalar kabi reaktsiyalarda ishtirok etadi. LUMO (Usnik kislotaning E_L= -0.08670 eV) energiyasi molekulaning elektronga yaqinligi, reaktivligi va barqarorligiga ta'sir qilishi mumkin (4-rasm).



Rasm-4. Usnik kislotasining LUMO qiymati

Usnik kislota uchun bo'shliq energiyasini (HOMO-LUMO energiya farqi) hisoblash uchun eng quyi band bo'lmagan molekulyar orbital (LUMO) energiyasidan eng yuqori band bo'lgan molekulyar orbital (HOMO) energiyasi ayiriladi.

- LUMO energiyasi (EL) = -0,08670 eV
- HOMO energiyasi (EH) = -0,22189 eV

Bo'shliq energiyasi = LUMO energiyasi - HOMO energiyasi

Bo'shliq energiyasi = (-0,08670 eV) - (-0,22189 eV)

Bo'shliq energiyasi = 0,13519 eV

Bo'shliq energiyasi molekuladagi eng yuqori band molekulyar orbitaldan (HOMO) elektronni eng quyi band bo'lmagan molekulyar orbitalga (LUMO) olib borish uchun zarur bo'lgan energiyani ifodalaydi. Bunday holda, usnik kislota uchun hisoblangan bo'shliq energiyasi 0,13519 eV ni tashkil qildi.

Kichikroq HOMO-LUMO bo'shlig'i molekula elektron o'tishlarga yoki boshqa molekulalar yoki yorug'lik bilan o'zaro ta'sirga ko'proq moyil bo'lishi mumkinligini ko'rsatadi. Bo'shliq energiyasi 0,13519 eV bo'lgan usnik kislotasi bo'lsa, molekula mos energiyadagi fotonlar bilan o'zaro ta'sir qilishi yoki katta bo'shliq energiyasiga ega bo'lgan molekulalarga nisbatan osonlik bilan elektron o'tishlarda ishtirok etishi mumkinligini ko'rsatadi.

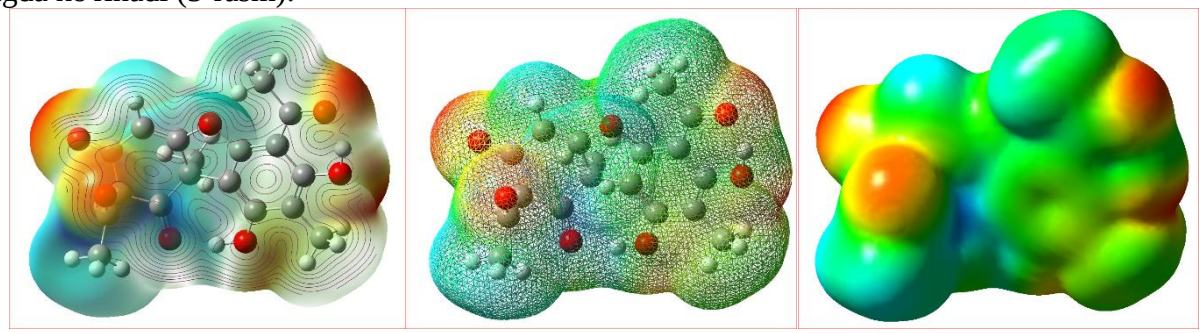
HOMO-LUMO bo'shlig'ini tushunish molekulaning elektron xususiyatlari, ayniqsa uning reaktivligi, barqarorligi va optoelektronika yoki fotokimyo kabi sohalarda potentsial qo'llanilishi haqida tushuncha beradi. Xulosa qilib aytganda, HOMO va LUMO molekulyar orbital nazariyaning asosiy tushunchalari bo'lib, ular molekulaning reaktivligi va uning kimyoviy reaktsiyalarda ishtirok etish qobiliyati haqida tushuncha beradi. HOMO elektron donorlik uchun javobgar, LUMO esa elektron qabul qilishda ishtirok etadi. Ushbu orbitallarning nisbiy energiyalari va xususiyatlarini tushunish kimyogarlarga oddiy reaktsiyalardan tortib murakkab transformatsiyalargacha bo'lgan turli xil kimyoviy jarayonlardagi molekulalarning harakatini bashorat qilish va tushuntirishga yordam beradi.

Elektrostatik potentsial (ESP) tahlillari. Elektrostatik potentsial (ESP) hisoblash kimyosi va molekulyar modellashtirish sohasidagi asosiy tushunchalardan biri bo'lib, molekula ichidagi elektron zaryadlarining taqsimlanishi haqida muhim tushunchalarni beradi. ESP tahlili molekulalarning o'zaro ta'siri, reaktivligi va turli fizik-kimyoviy xususiyatlarini tushunishda muhim rol o'ynaydi. Shu nuqtai nazardan, elektrostatik potentsial elektronlar va atom yadrolarining molekula ichida taqsimlanishidan kelib chiqadi. Elektronlar manfiy zaryadlangan bo'lib, yuqoriroq elektron

zichlikka ega bo'lgan hududlarni hosil qiladi, atom yadrolari esa musbat zaryadlari bilan kamroq elektron zichlikli hududlarni hosil qiladi.

Elektron zichligidagi bu o'zgarishlar butun molekulyar muhitda tarqaladigan elektr potentsial maydonlarini keltirib chiqaradi. ESP ni molekulaning elektron strukturasini aniqlash uchun Shredinger tenglamasini hal qiladigan zichlik funktsional nazariyasi (DFT) yoki ab initio hisoblari kabi kvant kimyoviy usullari yordamida hisoblash mumkin. Bu usullar atomlar va elektronlarning fazoviy joylashishini hisobga oladi, molekulyar fazoning turli nuqtalarida elektrostatik potentsialni hisoblash imkonini beradi.

Elektrostatik potentsial uning molekulyar sirtda tarqalishini tasavvur qilish uchun rang bilan kodlangan. Odatda, manfiy ESP hududlari qizil rangda ko'rsatilgan, bu yuqori elektron zichligi yoki elektronga boy hududlarni ko'rsatadi, musbat ESP hududlari esa nisbatan pastroq elektron zichligi yoki elektron taqchil hududlarni ifodalovchi ko'k rangda ko'rsatilgan. Neytral hududlar oq yoki yashil rangda ko'rinadi (5-rasm).



Rasm-5. Usnik kislotasining ESP (elektrostatik potensial sathi)

ESP tahlilidan olingan ma'lumotlar turli yo’nalishlarda juda katta ahamiyatga ega. U ligandlar va retseptorlar o'rtasidagi molekulyar tanib olish va bog'lanish o'zaro ta'sirini tushunishga, kimyoviy reaktsiyalarda reaktsiya joylarini bashorat qilishga, oqsil-ligandlarning o'zaro ta'sirini o'rganishga, molekulyar qutblanishni baholashga va o'ziga xos xususiyatlarga ega yangi dori va materiallarni loyihalashga yordam beradi. Bundan tashqari, ESP vizualizatsiyasi tadqiqotchilarga molekula ichidagi zaryad taqsimoti haqida intuitiv tushunchaga ega bo'lishga yordam beradi va molekulyar dizayn va rivojlanishni ratsionalizatsiya qilish va boshqarish uchun kuchli vositani taqdim etadi.

Xulosa. Ushbu tadqiqotda usnik kislotaning molekulyar tuzilmasi, bog‘ uzunliklari va elektron zaryad taqsimoti Gaussian 09 dasturi yordamida B3LYP/6-31G darajasida o‘rganildi. Hisoblash natijalari molekulaning kvant-mexanik asosda barqaror geometriyasini aniqlash, kimyoviy bog‘larning tabiati va elektron zichligining taqsimlanishini chuqur tahlil qilish imkonini berdi. Bu esa mazkur birikmaning molekulyar darajadagi xatti-harakatlarini yanada chuqurroq tushunishga xizmat qiladi.

Ushbu tadqiqotda usnik kislotasi *Xanthoparmelia conspersa* turiga mansub lishaynikdan ajratib olindi va uning molekulyar tuzilmasi zamonaviy kvant-kimyoviy usullar yordamida chuqur tahlil qilindi. Gaussian 09 dasturining DFT (B3LYP/6-31G) metodi asosida olib borilgan hisoblashlar usnik kislotaning elektron zaryad taqsimoti va bog‘ uzunliklari haqida aniqlangan ma’lumotlarni taqdim etdi.

Natijalarga ko‘ra, molekuladagi asosiy kimyoviy bog‘larning uzunligi, sp^2-gibridlangan karbon atomlarining joylashuvi va elektron zichlikning taqsimoti molekulaning barqaror tuzilishga ega ekanligini ko‘rsatdi. Zaryad taqsimoti esa usnik kislotaning elektrostatik fazoviy xususiyatlarini aniqlashda muhim rol o‘ynadi va uning reaksion markazlarini belgilashga yordam berdi.

Shuningdek, molekulada kuzatilgan muvozanatli geometriya, vodorod bog‘lanishlari va ehtimoliy tautomerik shakllar mavjudligi bu birikmaning kimyoviy va biologik xossalarini chuqurroq o‘rganishda muhim omil bo‘lishi mumkin. Olingan natijalar usnik kislotaning strukturaviy va elektron xossalarini to‘liq tushunishga xizmat qiladi va ularni farmakologik tadqiqotlar, dori dizayni yoki yangi bioaktiv moddalar sintezi uchun nazariy asos sifatida foydalanish mumkinligini ko‘rsatadi.

Ushbu tadqiqotda *Xanthoparmelia conspersa* lishaynigidan ajratib olingan usnik kislotasining elektrostatik potentsial (ESP) taqsimoti kvant-kimyoviy DFT usuli yordamida tahlil qilindi. ESP xaritasi molekuladagi elektron zichligi va zaryad taqsimotini aniqlashga imkon berib, uning reaktiv markazlarini va qutblanish xususiyatlarini aniqlashda muhim rol o‘ynadi. Olingan natijalar usnik kislotasining kimyoviy reaksiyalardagi faol nuqtalarini bashorat qilish, biologik faolligi va molekulyar o‘zaro ta’sirlarini tushunish uchun nazariy asos bo‘lib xizmat qiladi.

Adabiyotlar

1. Grube M., Cardinale M., de Castro J.V., Müller H., Berg G. Species-specific structural and functional diversity of bacterial communities in lichen symbioses // The ISME Journal. 2009. Vol. 3, № 9. P. 1105–1115. DOI: 10.1038/ismej.2009.63.
2. Grube M., Berg G. Microbial consortia of bacteria and fungi with focus on the lichen symbiosis // Fungal Biology Reviews. 2009. Vol. 23, № 3. P. 72–85. DOI: 10.1016/j.fbr.2009.10.001
3. Spribille T., Tuovinen V., Resl P., Vanderpool D., Wolinski H., Aime M.C., Schneider K., Stabentheiner E., Toome-Heller M. Basidiomycete yeasts in the cortex of ascomycete macrolichens // Science. 2016. Vol. 353, № 6298. P. 488–492. DOI: 10.1126/science.aaf8287.
4. Lepp H. What is a lichen? // Australian National Botanic Gardens. 2011. 7 March. URL: https://www.anbg.gov.au/lichen/what-is-lichen.html (data obrashcheniya: 10.10.2014).
5. Introduction to Lichens – An Alliance between Kingdoms // University of California Museum of Paleontology. 2014. URL: https://ucmp.berkeley.edu/fungi/lichens.html (data obrashcheniya: 22.08.2014).
6. Brodo I.M., Sharnoff S.D. Lichens of North America. New Haven; London: Yale University Press, 2001. 795 p. ISBN 978-0300082494.
7. Yeast emerges as hidden third partner in lichen symbiosis // ScienceDaily. 2016. 21 July. URL: https://www.sciencedaily.com/releases/2016/07/160721110529.htm (data obrashcheniya: 31.03.2024).
8. Ingolfsdottir K. Usnic acid // Phytochemistry. 2002. Vol. 61, № 7. P. 729–736.