

PHLOMOIDES NUDA O'SIMLIGI TARKIBIDAN AJRATIB OLINGAN AYRIM MODDALARNING TARKIBI VA TUZILISHINI KVANT-KIMYOVIY HISOBLASH METODI YORDAMIDA TAQQOSLASH

M.M.Mexmonxonov, F.Q. Abdullayeva, D.R.Xaydarova

Namangan davlat universiteti

<https://doi.org/10.5281/zenodo.15662379>

Annotatsiya: Ushbu ilmiy maqolada Namangan viloyati Yangiqo'rg'on tumanida o'suvchi *Phlomoides nuda* o'simligi tarkibidan ajratib olingan biologik faol birikmalar — **ekdisteron**, **α -ekdizon**, **8-O-asetilgarpagid**, **lamiid** va **pinitol** molekulalarining strukturasi DFT/B3LYP/3-21G usuli asosida kvant-kimyoviy hisoblash dasturi **Gaussian 98** orqali optimallashtirildi. Ularning **infraqizil tebranish (IQ) spektrlari** eksperimental va nazariy jihatdan qiyoslab tahlil qilindi. Natijalar shuni ko'rsatdiki, molekulalarning eksperimental spektrlari nazariy spektral cho'qqilar bilan yuqori darajada mos keladi. Ayniqsa, deformasion va valent tebranishlarga oid tebranish modlari aniqligi molekulalardagi halqalar soni, C-O, C-H, C-C bog'larining mavjudligini va tuzilmaning aniqligini tasdiqlaydi. Bu tahlil natijalari ajratilgan moddalarning kimyoviy strukturasi yuqorida keltirilgan formulalar asosida tasdiqlanishiga asos bo'ldi.

Kalit so'zlar: *Phlomoides nuda*, ekdisteron, α -ekdizon, 8-O-asetilgarpagid, lamiid, pinitol, DFT, Gaussian 98, infraqizil spektroskopiya, molekulyar strukturasi, vodorod bog'lanish, tebranish modlari.

СРАВНЕНИЕ СОСТАВА И СТРУКТУРЫ НЕКОТОРЫХ ВЕЩЕСТВ, ВЫДЕЛЕННЫХ ИЗ РАСТЕНИЯ PHLOMOIDES NUDA, С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО РАСЧЕТА

Аннотация: В данной научной статье рассмотрены результаты квантово-химического и спектроскопического анализа молекул **экдистерона**, **α -экдизона**, **8-O-ацетилгарпагида**, **ламида** и **пинитола**, выделенных из растения *Phlomoides nuda*, произрастающего в Янгикурганском районе Наманганской области. Структуры молекул были оптимизированы с использованием метода DFT/B3LYP и базиса 3-21G в программном пакете **Gaussian 98**. Экспериментально полученные ИК-спектры сравнивались с теоретически рассчитанными данными. Результаты анализа показали высокую степень совпадения спектральных пиков, что подтверждает достоверность определенным молекулярных структур. Особое внимание уделено валентным и деформационным колебаниям, связанным с наличием водородных связей, групп –OH, C–C, C–O, а также количеству и типу циклов в молекулах. Полученные результаты свидетельствуют об идентичности исследуемых соединений с представленными молекулярными формулами.

Ключевые слова: *Phlomoides nuda*, экдистерон, α -экдизон, 8-O-ацетилгарпагид, ламиид, пинитол, DFT, Gaussian 98, ИК-спектроскопия, молекулярная структура, водородные связи, колебательные моды.

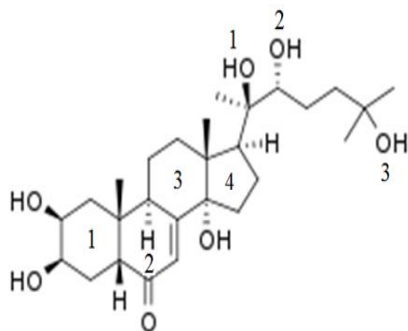
KIRISH

Phlomoides turkumiga mansub o'simliklar Markaziy Osiyo, jumladan, O'zbekiston florasida keng tarqalgan bo'lib, dorivor xususiyatlari bilan ajralib turadi. *Phlomoides nuda* o'simligi xalq tabobatida qo'llanilishi bilan birga, hozirgacha kimyoviy tarkibi yetarlicha o'rganilmagan. Shu munosabat bilan, ushbu tadqiqotda ushbu o'simlikdan ajratilgan biologik faol

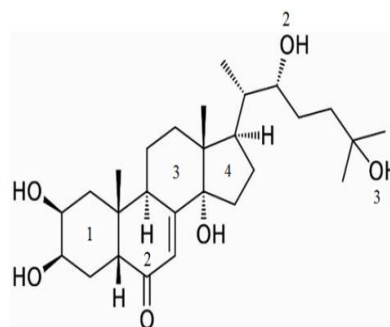
birikmalarning strukturasini aniqlash va ularning spektral xossalarini o'rganish maqsad qilindi. Namangan viloyati xududlarida o'suvchi *Phlomis* nuda o'simligi tarkibidan ajratib olingan ekdisteron, α -ekdizon, 8-O-asetilgarpagid, lamiid va pinitolning tuzilishini qiyosiy tahlil qilish orqali aniqlash maqsadida, mazkur birikmalar molekulyar strukturasining tebranish (IQ) spektrlari Gaussian 98 kvant-kimyoviy hisoblash dasturining DFT/B3LYP metodi 3-21G bazasida optimallashtirilgan holda hisoblandi.

ASOSIY QISM

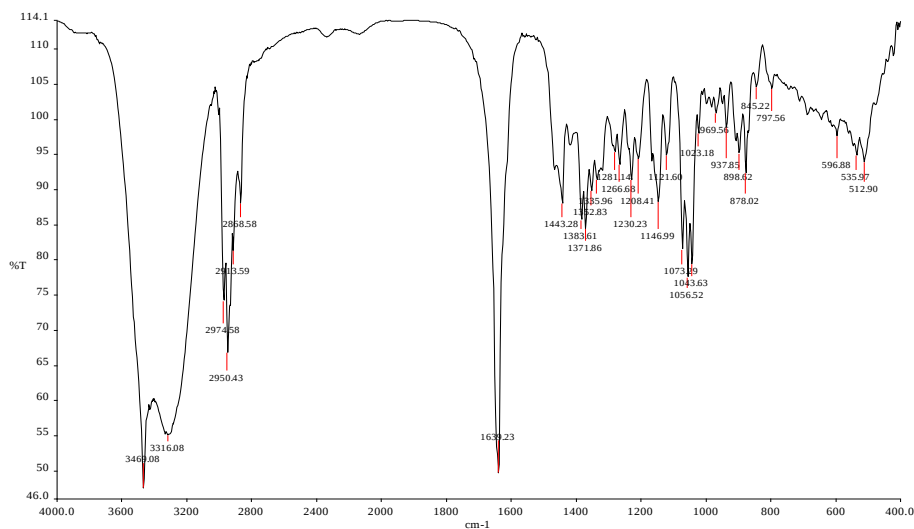
Moddalarining eksperimental yo'l bilan o'lchangan va dastur yordamida nazariy hisoblangan tebranish spektrlari qiyosiy tahlil qilindi. Ushbu tahlil dastlab ekdisteron va α -ekdizon molekullari uchun amalga oshirildi.



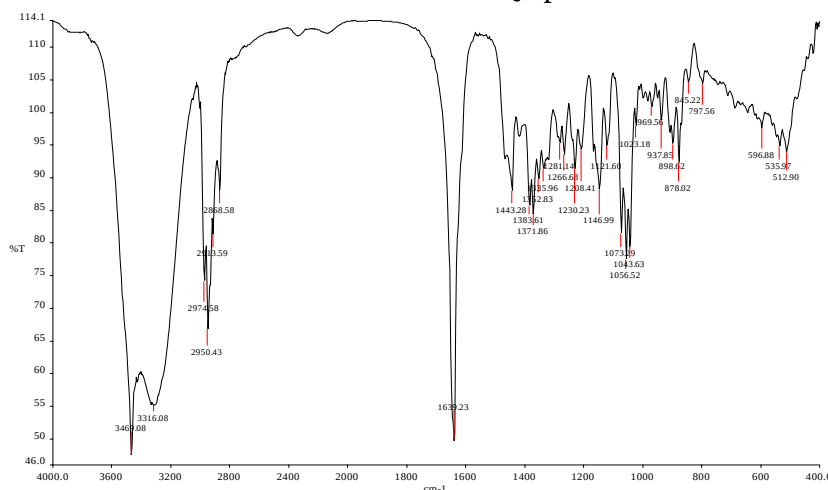
I.1-formula. Ekdisteron



I.2-formula. α -Ekdizon



I.3-rasm. α -Ekdizon IQ-spektri



I.4-rasm. Ekdisteron IQ- spektri

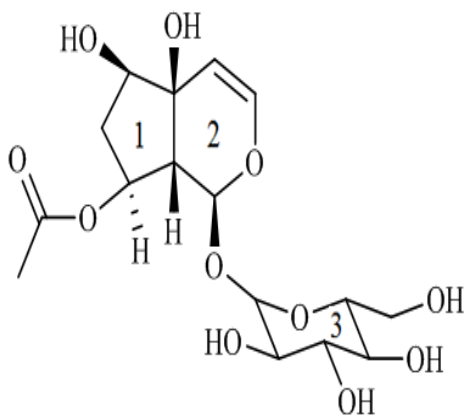
Moddalarining strukturalaridagi halqalar shartli ravishda nomerlandi (I.1-, I.2-, I.3-, I.4-rasmlar). Qiyosiy tahlil natijalari quyidagi jadvalda keltirilgan.

I.1-jadval. Ekdisteron va α -ekdzonning kvant kimyoviy xisoblangan va eksperimental aniqlangan IK-spektroskopik analizlari natijalari

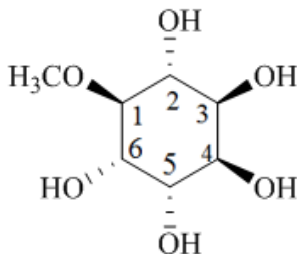
Tebranish turi	Ekdisteron		α -Ekdizon	
	Hisoblangan, sm^{-1}	Aniqlangan, sm^{-1}	Hisoblangan, sm^{-1}	Aniqlangan, sm^{-1}
$\delta_{\text{s(OH)}}$ 1-halqada	541	534	515	512
$\pi_{\text{(CH)}}$ 3-halqada	608	621	605	598
$\pi_{\text{(OH)}}$ yon zanjirdagi 1-OH	676	685	-	-
$\tau_{\text{(CH)}}$ 1-2 halqada	852	847	850	845
$\pi_{\text{(CCC)}}$ 3-4 halqada	880	883	881	878
$\tau_{\text{(OH)}}$ yon zanjirdagi 1-OH	902	911	-	-
$\nu_{\text{as(CC)}}$ 4 halqalar	1052	1055	1053	1056
$\nu_{\text{as(CC)}}$ 2 halqada	1143	1141	1143	1146
$\nu_{\text{as(CO)}}$ 2 halqada	1226	1234	1228	1230
$\nu_{\text{as(CCC)}}$ 3-halqada	1381	1371	1380	1384
$\nu_{\text{s(CCC)}}$ yon zanjir	1446	1443	1448	1451
$\nu_{\text{s(C-O)}}$ 1-halqada	1652	1639	1654	1690
$\nu_{\text{s(OH)}}$ yon zanjirdagi 1-OH	2960	2950	-	-
$\nu_{\text{s(OH)}}$ yon zanjirdagi 2-3 -OH	3100	2966	3105	2974
$\nu_{\text{as(OH)}}$ 1- halqada	3320	3401	3320	3469

Ekdisteron va α -Ekdizonning eksperimental yo'l bilan aniqlangan va hisoblangan IQ-spektrlaridagi yutilish cho'qqilari mos ravishda bir- biriga juda yaqin ekanligi yuqoridagi jadvaldan ko'rinib turibdi. Ayniqsa, eksperimental yo'l bilan olingan IQ-spektrda Ekdisteron va α -ekdzon molekularidagi shartli 1- va 2- halqalardagi C-H bog'ining, 3 va 4-halqalaridagi C-C-C bog'larining deformasion ($\tau_{\text{(CH)}}$) hamda valent ($\nu_{\text{as(SSS)}}$) tebranishlarining nazariy hisoblangan yutilish cho'qqilariga mos ravishda yaqinligi Ekdisteron va α -Ekdizon molekulasida 4 ta halqa mavjud ekanligini bildiradi. Shuningdek, 2 halqalaridagi C=O bog'ining valent tebranishiga ($\nu_{\text{as(CO)}}$) xos bo'lgan yutilish cho'qqilarining (1234, 1230 sm^{-1}), hisoblangan natijalar bilan mos ekanligi (1226, 1228 sm^{-1}), aniqlanayotgan molekulning 2 halqalarida karbonil guruhi borligidan dalolat beradi. Qolaversa, aniqlangan IQ-spektrda molekuladagi O-H bog'larining valent ($\nu_{\text{s(OH)}}$)tebranishlariga xos bo'lgan yutilish sohasining kengligi (3401, 3469 sm^{-1}) va hisoblangan yutilish cho'qqilariga mosligi molekulararo vodorod bog'lanish mavjud ekanligini anglatadi. Ahamiyatli jihati shundaki, ekdisteronning o'lchangan va hisoblangan IQ-spektrida molekuladagi yon zanjirdagi shartli 1-OH ning deformasion ($\pi_{\text{(ON)}}$, $\tau_{\text{(OH)}}$) va valent ($\nu_{\text{s(OH)}}$) tebranishlariga xos bo'lgan yutilish sohalaridagi to'liq sonlari – cho'qqilar mavjud, α -ekdzonning o'lchangan va hisoblangan IQ-spektrlarida esa ushbu cho'qqilar kuzatilmaydi. Bu esa ajratib olingan α -ekdzonning yon zanjirida shartli 1-OH guruhi yo'q hamda .1.4-rasmdagi strukturaga mos kelishiga ilmiy asos bo'ladi.

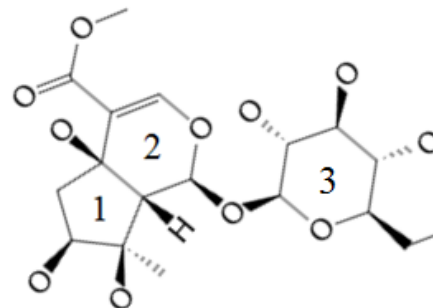
Ushbu yo‘nalishda olib borilgan keyingi tajribalarda 8-O-asetilgarpagid, lamiid va pinitolning tuzilishi ularning eksperimental o‘lchangan va kvant-kimyoviy hisoblangan IQ-spektrlarini qiyosiy tahlil qilish orqali aniqlandi. IQ-spektr spektroskopik tahlil natijalarini interpretatsiya qilishni qulaylashtirish maqsadida 8-O-asetilgarpagid va lamid molekularidagi halqalar ham shartli ravishda raqamlandi (1.8-, 1.9-rasm).



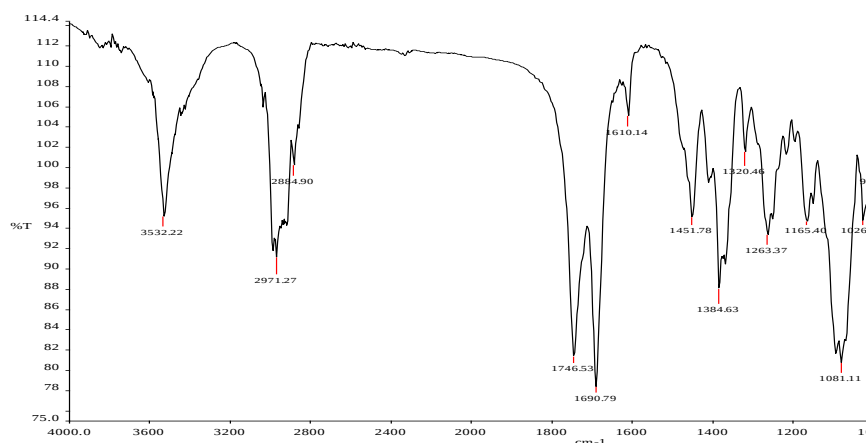
I.5-formula. 8-O-asetilgarpagid



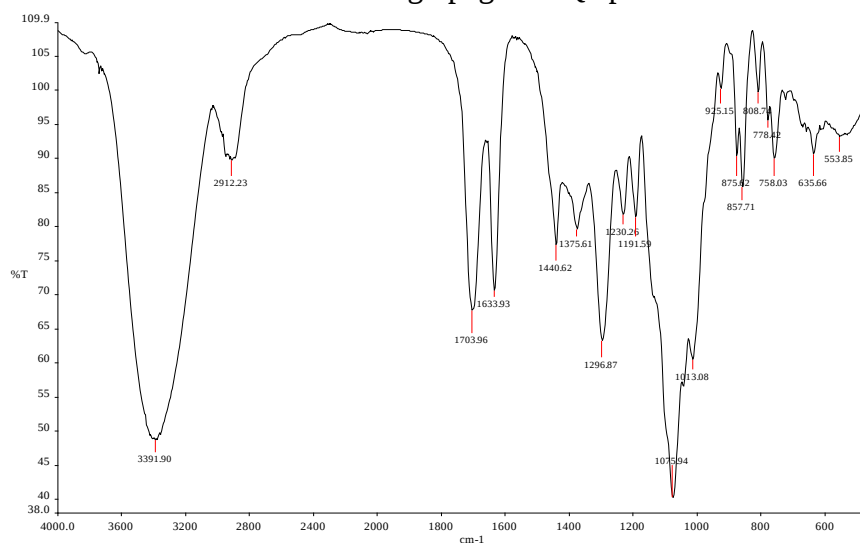
I.7-rasm. Pinitol



I.6-formula. Lamiid



I.8-rasm. 8-O-asetilgarpagidni IQ-spektri



I.9-rasm. Pinitolni IQ-spektri

IQ-spektr spektroskopik tahlil natijalari quyidagi jadvalda keltirilgan.

I.2-jadval. 8-O-asetilgarpagid va lamiid, pinitolning kvant kimyoviy xisoblangan va eksperimental aniqlangan IK-spektroskopik analizlari natijalari

Tebranish turi	8-O-asetil-garpagid		Lamiid		Tebranish turi	Pinitol	
	Hisoblangan, sm ⁻¹	Aniqlangan, sm ⁻¹	Hisoblangan, sm ⁻¹	Aniqlangan, sm ⁻¹		Hisoblangan, sm ⁻¹	Aniqlangan, sm ⁻¹
$\pi_{(CCC)}$ 1-halqada	487	491	423	419	$\delta_{s(OH)}$ 3-,4-ugleroddagi	557	553
$\pi_{(CCC)}$ 3-halqada	734	747	730	737	$\pi_{(CH)}$ 5-,6ugleroddagi	641	635
$\delta_{s(CCC)}$ 2-halqada	821	815	779	786	$\pi_{(OH)}$ 1-,2-ugleroddagi	751	758
$\pi_{(CH)}$ 1-halqada	912	907	915	920	$\pi_{(CH)CH_3}$ -da	775	778
(OH) 2-halqada	953	956	961	965	(OH) 3-, 4-, 5-ugleroddagi	803	808
$\nu_{as(COC)}$ 2-halqada	1087	1081	1091	1095	$\pi_{s(CCC)}$ 1-6uglerodgacha	852	857
$\nu_{as(COC)}$ 3-halqada	1158	1165	1171	1184	$\pi_{as(CCC)}$ 1-6uglerodgacha	878	875
$\nu_{as(CO)}$ 1 halqadagi yon zanjir	1267	1263	1270	1279	$\nu_{(COC)}$ 1-ugleroddagi	1021	1013
$\nu_{as(COC)}$ 2-halqada	1378	1384	1365	1363	$\nu_{as(COH)}$ 2-,5-ugleroddagi	1082	1075
$\nu_{as(CCC)}$ 3-halqada	1460	1451	3251	3350	$\nu_{s(COH)}$ 1-ugleroddagi	1194	1191
$\nu_{s(CH)}$ 1-2-halqada	1440	1437	1463	1469	$\nu_{s(CO)}$ 1-ugleroddagi	1241	1230
$\nu_{as(CCC)}$ 3-halqada	1505	1511	1507	1512	$\nu_{as(CO)}$ 3-,4-ugleroddagi	1289	1296
$\nu_{as(COO)}$ 1-halqadagi yon zanjir(COO)	1602	1609	-	-	$\nu_{s(CO)}$ 2-,5-ugleroddagi	1371	1375
$\nu_{s(COC)}$ 2-3-halqalar orasida	1684	1690	1648	1651	$\nu_{s(CC)}$ 2-3-uglerodlar	1436	1440

$\nu_{\text{S(C-O)}}$ 3-halqagi yon zanjir -CH ₂ -O-	1748	1746	-	-	$\nu_{\text{S(H3CO)}}$ 1-ugleroddagi	1640	1633
$\nu_{\text{S(OH)}}$ 1-halqa	3110	2971	3113	2922	$\nu_{\text{S(CO)}}$ 4-, 5-uglerodlar		1703
$\nu_{\text{S(OH)}}$ 3 halqa	3345	3532	3348	3342	$\nu_{\text{S(OH)}}$ 2-, 5-uglerodlar		2912
					$\nu_{\text{as(OH)}}$ 2-,3-, 4-, 5-uglerodlar	3220-3416	3391

8-O-asetilgarpagid va Lamiidning nazariy kvant-kimyoviy hisoblangan va eksperimental yo'l bilan aniqlangan IQ-spektrlaridagi yutilish cho'qqilari mos ravishda bir- biriga juda yaqin ekanligi yuqoridagi jadvaldan ko'rinib turibdi. Ayniqsa, 8-O-asetilgarpagid molekulasidagi eksperimental yo'l bilan olingan IQ-spektrda shartli 1-, 2-, 3- halqalardagi C-C bog'larining va 1-halqadagi C-H bog'larining deformasion (π_{CCC} , $\delta_{\text{S(CCC)}}$, $\pi_{\text{(CH)}}$) tebranishlari, 2- va 3-halqadagi C-O-C bog'larining, 1-,2-, 3-halqalardagi C-C-C bog'larining valent (ν_{as}) tebranishlariga xos bo'lgan yutilish cho'qqilari, mos ravishda, nazariy hisoblangan yutilish cho'qqilariga juda yaqinligi ko'rindi. Ayniqsa, nazariy hisoblangan yutilish cho'qqilari qatorida 1- va 2-halqa orasidagi C-O-C bog'ining valent (ν_{S}) tebranishiga xos bo'lgan yuqori intensivlikdagi yutilish cho'qqilari, eksperimental yo'l bilan olingan IQ-spektrda ham mavjudligi hamda hisoblash natijalariga yaqin ekanligi aniqlandi. Qolaversa, hisoblangan natijalarda kuzatilgan 8-O-asetilgarpagid va lamiid molekulasidagi O-H bog'ining valent (ν_{C}) tebranishiga xos bo'lgan bir nechta yutilish C-C o'qqilarining, eksperimental aniqlangan IQ-spektrdagi mazkur cho'qqilarga yaqinligi o'rganilayotgan molekula 8-O-asetilgarpagid va lamiidga tegishli ekanligini bildiradi.

Bu esa, tadqiq etilayotgan 8-O-asetilgarpagid va lamiid molekulasining individual ekanligini va yuqorida keltirilgan 2.8, 2.9-rasmlardagi molekulyar strukturaga mos ekanligini bildiradi. Shuni ham ta'kidlash joizki, eksperimental aniqlangan IQ-spektrda 3532-3342 sm^{-1} sohada keng yutilish sohasi mavjudligi molekulalararo vodorod bog'lanish mavjud ekanligidan dalolat beradi.

Shu bilan birga, pinitolning eksperimental yo'l bilan aniqlangan IQ-spektridagi C-C (π_{CCC} , $\nu_{\text{as(CCC)}}$), C-H ($\nu_{\text{(CH)}}$, $\nu_{\text{(CH)}}$), C-O ($\delta_{\text{S(C-O)}}$, $\nu_{\text{as(C-O)}}$) bog'larining deformasion va valent tebranishlariga hol bo'lgan yutilish cho'qqilarining nazariy hisoblangan natijalarga juda yaqin ekanligi tadqiq etilayotgan birikmaning tuzilishi yuqoridagi 1.7-rasmdagi molekulaning tuzilishiga mos keladi. Shuningdek, o'lgangan spektrda 758, 778, 808, 1013, 1191, 1633, 3391 sm^{-1} sohalarida yutilish cho'qqilarining mavjudligi va hisoblangandagiga mosligi, mos ravishda, molekuladagi C-O, C-H, C-O-C, CH₃-O, CH₃-O-C kabi bog'larning deformasion (π_{CCC}) va valent tebranishi, hamda O-N bog'ining valent ($\nu_{\text{S(OH)}}$) tebranishlari mavjudligini anglatadi. Bu esa, molekulada bir nechta -OH guruhlar borligidan dalolat beradi.

XULOSA

Xulosa qilib aytganda, ekdisteron, α -ekdizon, 8-O-asetilgarpagid, lamiid va pinitolning eksperimental yo'l bilan aniqlangan IQ-spektridagi yutilish cho'qqilari, mos ravishda, nazariy kvant-kimyoviy hisoblangan yutilish cho'qqilariga juda yaqin keldi. Bu esa, aniqlanayotgan birikmalarning tuzilishi yuqorida keltirilgan ekdisteron, α -ekdizon, 8-O-asetilgarpagid, lamiid va pinitolning yuqorida keltirilgan struktur formulalariga mos ekanligini isbotlaydi.

Foydalanilgan adabiyotlar.

1. Moench, H. (2023). Phlomoides Systematics and Phytochemistry. *Journal of Medicinal Plants Research*, 15(2), 115-130.
2. Gaussian 98 User's Reference. Gaussian, Inc., Pittsburgh, 2001.
3. Ikromov, S., & Xudoyberganov, A. (2020). O'zbekiston florasi. Toshkent: Fan.
4. Tursunov, M., & Valiev, A. (2019). Biological Activity of Plant-Derived Ecdysteroids. *Uzbekistan Journal of Natural Sciences*, 8(3), 50-56.
5. Zhang, L., et al. (2018). Phytochemical Analysis of Ecdysteroids from Plant Extracts. *Phytochemistry*, 145, 23-34.
6. Chen, Y., Wang, Z., & Li, H. (2017). Molecular Docking of Plant Ecdysteroids and Their Effects on Human Cells. *Molecular Biology Reports*, 44(5), 333-340.
7. Akhmedov, M. (2015). *Infrared Spectroscopy in Plant Chemistry Studies*. Tashkent: Science and Technology Publishing.
8. Kurbanov, A., & Mahmudov, H. (2014). Application of Quantum Chemistry in Plant Secondary Metabolites Analysis. *Chemica Scripta*, 7(1), 23-29.