



Aziza ABDURAHMONOVA,  
O'zbekiston Milliy universiteti talabasi  
Dilnoza BO'RIYEVA,  
O'zMU katta o'qituvchisi, PhD  
E-mail: dilnozaboriyeva133@gmail.com

Toshkent farmasevtika instituti professori, k.f.d. A.Karimov taqrizi asosida

#### 4-METOKSI-N-FENILBENZAMIDNING FARMAKOLOGIK FAOLLIKLARINI PASS DASTURIDA O'RGANISH

##### Annotsatsiya

p-Metoksibenzoil kislotaning anilin bilan hosil qilgan amidning farmakologik faolligi PASS dasturida tekshirildi. 4-metoksi-N-fenilbenzamid birikmasining potensial antibakterial faolligi tekshirilganda eng yuqori baholash ko'rsatkichi **0.7479** bo'lib, u *Yersinia pestis* ga qarshi kuzatildi. 4000 dan ortiq biologik faollik turlari bo'yicha prognoz tahlili amalga oshirilganda esa eng yuqori ehtimollik ko'rsatkichlari membrana bilan bog'liq biologik jarayonlar va oksidlanish-qaytarilish ferment tizimlariga ta'sir qiluvchi faoliyatlarda kuzatildi. Tadqiq qilinayotgan birikmaning ehtimoliy saratonga qarshi faolligi Hs 683 ( $P_a = 0.499$ ) hujayra liniyasida kuzatildi va normal (saraton bo'lmagan) hujayra liniyalariga nisbatan bashorat qilingan faollik esa nisbatan past qiymatlarni ko'rsatdi. Umuman olganda, olingan natijalar tadqiq qilinayotgan birikma saraton hujayralariga nisbatan selektiv sitotoksik ta'sirga ega bo'lishi mumkinligini, normal hujayralarga esa nisbatan past ta'sir ko'rsatishini ko'rsatadi. Sintez qilingan birikmaning kemiruvchilarda organlarga xos kanserogenlikni in silico bashoratiga ko'ra ayrim kemiruvchi organlarida o'sma rivojlanish ehtimolini ko'rsadi. Ayniqsa siydik pufagi barcha modellar (erkak va urg'ochi kalamush hamda sichqonlar) bo'yicha eng yuqori ehtimollik qiymatlarini ko'rsatdi.

**Kalit so'zlar:** PASS Online, biologik faollik, kompyuterda bashorat qilish, organik birikmalar, farmakologik.

#### STUDY OF THE PHARMACOLOGICAL ACTIVITIES OF 4-METHOXY-N-PHENYLBENZAMIDE IN THE PASS PROGRAM

##### Annotation

The pharmacological activities of the amide formed from p-methoxybenzoic acid and aniline were evaluated using the PASS program. When assessing the potential antibacterial activity of 4-methoxy-N-phenylbenzamide, the highest prediction score ( $P_a = 0.7479$ ) was observed against *Yersinia pestis*. A comprehensive prediction analysis covering more than 4,000 types of biological activities revealed that the highest probability values were associated with membrane-related biological processes and activities affecting redox enzyme systems. The predicted anticancer activity of the studied compound was observed in the Hs 683 cell line ( $P_a = 0.499$ ), while the predicted activity toward normal (non-cancerous) cell lines showed relatively lower values. Overall, these results suggest that the investigated compound may exhibit selective cytotoxic effects against cancer cells, with comparatively low toxicity toward normal cells. According to in silico predictions of organ-specific carcinogenicity in rodents, the synthesized compound showed a potential to induce tumor development in certain organs. In particular, the urinary bladder demonstrated the highest probability values across all models (male and female rats and mice).

**Keywords:** PASS Online, biological activity, computational prediction, organic compounds, pharmacology.

**Kirish.** PASS Online (Prediction of Activity Spectra for Substances) - moddalarning biologik faollik spektrini strukturaga asoslanib bashorat qiluvchi in silico dastur. PASS dasturi bir vaqtning o'zida moddaning strukturaviy formulasiga asoslangan 780 dan ortiq farmakologik ta'sir va biokimyoviy mexanizmlarni moddaning 2D strukturasi asosida oldindan prognoz (bashorat) qiladi.

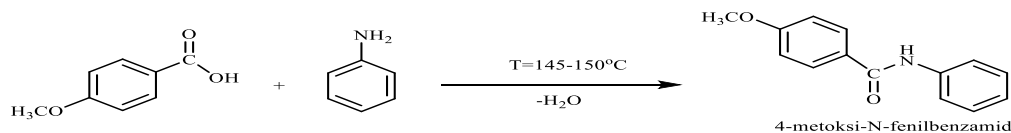
PASS Online dasturi "Biotibbiy kimyo instituti" (Institute of Biomedical Chemistry (Moskva, Rossiya)) professori Vladimir Poroikov tomonidan ishlab chiqilgan va kimyoviy birikmalarning strukturasi asoslanib ularning bir qancha farmakologik faolligi, biokimyoviy ta'siri, toksikologik xususiyatlari va ta'sir mexanizmga oid bir qancha ilmiy maqolalar chop etirgan. PASS Online dasturida olingan natijalarni amaliyotda qo'llab olingan natijalar bilan taqqoslagan. [1,2,3,4,5].

Hozirgi kunda organik birikmalarning biologik faollik spektrlarini bashorat qilish uchun 1000 000 dan ortiq biologik faol organik birikmalar haqida ma'lumotni o'z ichiga PASS dasturining bir qancha versiyalari taklif qilingan. PASS dasturiga internet orqali <http://way2drug.com/dr> manzilida bepul kirish mumkin. Way2Drug portalidagi veb-xizmatlardan 100 ga yaqin mamlakatda ishlaydigan 24 000 dan ortiq tadqiqotchilar foydalanadilar. Hozirda 830 000 dan ortiq bashoratlar qilingan va kimyoviy sintez uchun eng istiqbolli birikmalar tanlangan, hamda ularning biologik faolligini sinash uchun metodlar belgilangan. PharmaExpert dasturiy ta'minoti PASS va GUSAR asosidagi bashoratlar natijalarini tahlil qilish va zarur biologik faollik spektrlariga ega kimyoviy birikmalarni qidirish uchun ishlab chiqilgan. PASS, GUSAR va PharmaExpert dasturlaridan birgalikda foydalanish tizimli farmakologiya asosida yangi birikmalarning farmakoterapevtik, nojo'ya va toksik ta'sirini baholash imkonini beradi [5,6,7,8].

Kimyoviy birikmalarning muhim xususiyati ularning biologik faolligidir, chunki uning mavjudligi moddani terapevtik maqsadlarda qo'llash uchun asos bo'lishi mumkin yoki aksincha, yon ta'sir va toksik ta'sirlarning namoyon bo'lishi tufayli uning amaliy qo'llanilish imkoniyatlarini cheklashi mumkin. Biologik faollik spektrlarini kompyuterda baholash muayyan moddalarning farmakologik ta'sirini o'rganishning eng istiqbolli yo'nalishlarini aniqlash va tadqiqotning dastlabki bosqichlarida potentsial xavfli molekullarni saralash imkonini beradi.

PASS SAR (Structure-Activity Relationship) algoritimiga asoslangan. Asosiy tamoyil: strukturalari o'xshash moddalar - o'xshash biologik faollik ko'rsatadi. U katta ma'lumotlar bazasiga asoslanadi: 300 000 dan ortiq modda va 4000 biologik faoliyat turi asosida ma'lumotlarni qayta ishlaydi. PASS Online dasturida Pa va Pi qiymatlari moddaning ma'lum bir biologik faollikka ega bo'lish ehtimolini ko'rsatadi. Pa - (Probability of Activity) Faollik ehtimoli bo'lib bu moddaning ma'lum biologik faollikka ega bo'lish ehtimoli. Qiymat 0 dan 1 gacha bo'ladi. Pi - (Probability of Inactivity) Faolsizlik ehtimoli bo'lib bu moddaning biologik faollikning yo'qligi ko'rsatgichidir. Faolsizlik ehtimoli ham 0 dan 1 gacha bo'ladi. Shuni ta'kidlash kerakki, ehtimollik Pa asosan ma'lum bir molekula tuzilishining o'quv to'plamida mos keladigan kichik guruhidagi eng tipik faol birikmalar molekularining tuzilishiga o'xshashligini aks ettiradi. Shunday qilib, qoida tariqasida, Pa qiymatlari miqdoriy faollik xususiyatlari bilan to'g'ridan-to'g'ri bog'liqligi yo'q. O'quv to'plami uchun odatiy bo'lmagan molekulyar tuzilishga ega bo'lgan haqiqatan ham faol molekula bashoratda past Pa qiymatiga ega bo'lishi mumkin, hattoki Pa < Pi bo'lishi ham mumkin. O'quv to'plamidagi faol birikmalar uchun Pa va nofaol birikmalar uchun Pi qiymatlari qat'iy bir xillikda taqsimlangan. Bashorat natijalarini talqin qilishning yana bir muhim jihati tahlil qilingan birikmaning yangiligi bilan bog'liq. Agar biz o'zimizni faqat Pa ning eng yuqori qiymatlari bilan bashorat qilingan faollik turlari bilan cheklasak, bashorat orqali tanlangan birikmalar ma'lum farmakologik agentlarning analoglari bo'lib chiqishi mumkin. Masalan, Pa > 0,7 bo'lganda, eksperimental faollikni topish ehtimoli ancha yuqori, ammo topilgan birikmalar ma'lum dorilarning yaqin strukturaviy analoglari bo'lishi mumkin. Agar biz 0,5 < Pa < 0,7 oralig'ida tanlasak, eksperimental faollikni aniqlash imkoniyati pastroq bo'ladi, ammo birikmalar ma'lum farmatsevtik agentlarga kamroq o'xshash bo'ladi. Pi < Pa < 0,5 uchun eksperimental faollikni aniqlash imkoniyati yanada pastroq bo'ladi, ammo agar bashorat tasdiqlansa, topilgan birikma tekshirilayotgan biologik faollik uchun yangi kimyoviy sinf uchun boshlang'ich birikma bo'lishi mumkin. Agar bashorat qilingan faollik spektri keng bo'lsa, bu birikmaning molekulyar tuzilishi ancha sodda va biologik ta'sirining yuqori selektivligini ta'minlovchi biron bir xususiyatga ega emas. Ba'zi hollarda, birikma uchun bir vaqtning o'zida ikkita o'zaro istisno qiluvchi faollikni bashorat qiladi, masalan, agonist va antagonist, stimulyator va bloker, shuningdek, ma'lum bir retseptorning aktivatori va ingibitori sifatida. Bu holda, PASS dasturini bashorat qilish birikmaning mumkin bo'lgan "ichki" faollikni farqlashga imkon bermaydi va faqat ma'lum bir retseptor, ferment yoki tashuvchiga nisbatan ehtimoliy yaqinlikni ko'rsatadi. PASS dasturi bizga stereoisomerizmning biologik faollik ko'rsatkichiga ta'sirini baholashga imkon bermaydi [2].

**Tadqiqot metodologiyasi.** Adabiyotlarda keltirilgan ma'lumotlarga asoslanib p-metoksibenzoy kislotaning anilin bilan hosil qilgan amidning farmakologik faolliklari PASS dasturida tekshirildi. p-Metoksibenzoy kislotaning anilin bilan reaksiyasi quyidagicha boradi [9].



Dastlab 4-metoksi-N-fenilbenzamid birikmasining potensial antibakterial faolligi PASS Online platformasi yordamida bashorat qilindi. Olingan natijalar moddaning turli patogen mikroorganizmlarga nisbatan biologik faollik ehtimolini ko'rsatadi. Natijalarga ko'ra, eng yuqori baholash ko'rsatkichi **0.7479** bo'lib, u *Yersinia pestis* ga qarshi kuzatildi. Bu qiymat tekshirilayotgan birikmaning ushbu mikroorganizmlarga nisbatan yuqori darajada potensial antibakterial ta'sir ko'rsatishi mumkinligini bildiradi. Shuningdek, nisbatan yuqori ko'rsatkichlar quyidagi mikroorganizmlarda aniqlandi: *Staphylococcus simulans* (0.4103), *Parabacteroides merdae* (0.4004), *Actinomyces israelii* (0.3697) va *Bacteroides uniformis* (0.3653). Ushbu natijalar birikmaning Gram-musbat hamda anaerob bakteriyalar guruhiga mansub ayrim mikroorganizmlarga nisbatan ham potensial faollikka ega ekanligini ko'rsatadi. Bundan tashqari, o'rta darajadagi faollik ehtimoli *Bacillus licheniformis*, *Porphyromonas asaccharolytica*, *Mycobacterium marinum* va *Prevotella bivia* kabi mikroorganizmlarga nisbatan ham qayd etildi. Natijalarda ayrim **rezistent shtammlar** (dori vositalariga chidamli shtammlar) uchun ham ma'lum darajada faoliyat ehtimoli kuzatildi. Jumladan, *Helicobacter pylori* va *Clostridium difficile* rezistent shakllariga nisbatan mos ravishda 0.2918 va 0.1623 qiymatlar aniqlangan. Bu esa moddaning antibiotiklarga chidamli bakteriyalarga qarshi ham potensial samaradorligini ko'rsatishi mumkin. Umuman olganda, PASS online prognoz natijalari 4-Metoksi-N-fenilbenzamid birikmasi turli Gram-musbat, Gram-manfiy va anaerob bakteriyalar guruhiga qarshi potensial antibakterial faollikka ega bo'lishi mumkinligini ko'rsatdi. Eng yuqori faollik ehtimoli *Yersinia pestis* ga nisbatan kuzatilgan bo'lib, bu birikma kelgusida antibakterial vositalar sifatida chuqurroq eksperimental tadqiqotlar o'tkazishni talab qiladi.

Keyin PASS Online dasturi orqali 4-metoksi-N-fenilbenzamid birikmasining 4000 dan ortiq biologik faollik turlari bo'yicha prognoz tahlili amalga oshirildi. PASS prognoz natijalariga ko'ra, o'rganilgan 4-metoksi-N-fenilbenzamid birikmasi turli biologik tizimlarga ta'sir ko'rsatishi mumkin bo'lgan ko'plab potensial faolliklarga ega ekanligi aniqlangan. Eng yuqori ehtimollik ko'rsatkichlari membrana bilan bog'liq biologik jarayonlar va oksidlanish-qaytarilish ferment tizimlariga ta'sir qiluvchi faoliyatlarda kuzatildi. Tahlil natijalariga ko'ra, eng yuqori prognoz qilingan faollik *membrane integrity agonist* sifatida aniqlanib, uning ehtimollik ko'rsatkichi Pa = 0.919 ni tashkil etdi. Bu natija birikmaning hujayra membranasi barqarorligini tartibga soluvchi yoki himoya qiluvchi xususiyatlarga ega bo'lishi mumkinligini ko'rsatadi. Shuningdek, yuqori ehtimollik bilan *ubiquinol-cytochrome-c reductase inhibitor* (Pa = 0.877) faolligi prognoz qilindi. Ushbu ferment mitoxondriyal nafas olish zanjirining muhim komponentlaridan biri bo'lib, uning ingibitsiyasi moddaning bioenergetik jarayonlarga ta'sir qilish ehtimolini bildiradi. Yuqori ehtimollikka ega bo'lgan boshqa ferment ingibitorlari qatoriga *aspulvinone dimethylallyltransferase inhibitor* (Pa = 0.868) va *taurine dehydrogenase inhibitor* (Pa = 0.841) kiradi. Bu fermentlar metabolik jarayonlarda muhim rol o'ynaydi, shuning uchun ularning ingibitsiyasi birikmaning metabolik faol modda sifatida potensial ahamiyatini ko'rsatadi. Bundan tashqari, modda proteolitik fermentlarga ta'sir qiluvchi ingibitor sifatida ham yuqori faollik ehtimolini ko'rsatdi. Jumladan, *chymosin inhibitor*, *saccharopepsin inhibitor* va *acrocylindropepsin inhibitor* faoliyatlari uchun Pa ≈ 0.808 qiymati qayd etildi. Ushbu natijalar birikmaning proteaza fermentlari faoliyatini tartibga soluvchi xususiyatlarga ega bo'lishi mumkinligini ko'rsatadi. Metabolik fermentlar guruhida ham sezilarli prognoz ko'rsatkichlari aniqlangan. Xususan, *amine dehydrogenase inhibitor* (Pa = 0.775), *methylenetetrahydrofolate reductase inhibitor* (Pa = 0.783) va *spermidine dehydrogenase inhibitor* (Pa = 0.751) kabi faoliyatlar moddaning turli metabolik yo'llarga ta'sir qilish ehtimolini bildiradi. Shu bilan birga, *5-hydroxytryptamine release inhibitor* (Pa = 0.717) faolligi ham aniqlangan bo'lib, bu birikmaning neyromediator tizimlariga ta'sir ko'rsatishi mumkinligini ko'rsatadi. PASS prognoz natijalari 4-metoksi-N-fenilbenzamid birikmasi ferment ingibitori sifatida yuqori biologik potensialga ega ekanligini ko'rsatdi. Ayniqsa membrana barqarorligi, oksidlanish-qaytarilish fermentlari hamda metabolik ferment tizimlariga ta'sir qiluvchi faoliyatlarining yuqori ehtimollik bilan aniqlanishi ushbu birikmaning farmakologik jihatdan istiqbolli biologik faol modda bo'lishi mumkinligini ko'rsatadi.

Har qanday dori moddasi organizmga kiritilganda u ma'lum farmakologik ta'sir ko'rsatadi. Shu bilan birga, asosiy terapevtik ta'sirdan tashqari nojo'ya ta'sirlar ham yuzaga kelishi mumkin. Nojo'ya ta'sirlar odatda dorining farmakologik mexanizmi, dozasi yoki organizmning individual sezgirligi bilan bog'liq bo'ladi. Agar moddaning ta'siri kuchli bo'lib, hujayra va to'qimalarga zarar yetkazsa, bu

holat toksik ta'sir sifatida namoyon bo'ladi. Demak, dori, nojo'ya ta'sir va toksik ta'sir o'rtasidagi bog'liqlik dorining biologik faoliyati va organizm bilan o'zaro ta'siri natijasida yuzaga keladi.

PASS Online dasturi yordamida o'rganilgan 4-metoksi-N-fenilbenzamid birikmasining ehtimoliy nojo'ya va toksik ta'sirlari ham prognoz qilindi. Natijalar tahliliga ko'ra, ayrim klinik nojo'ya ta'sirlar uchun yuqori ehtimollik ko'rsatkichlari qayd etildi. Eng yuqori prognoz qiymatlaridan biri *afthoz yara (Ulcer, aphthous)* uchun aniqlanib, Pa = 0.848 ni tashkil etdi. Bundan tashqari, *pseudoporphyria* (Pa = 0.787) va *galaktoreya* (Pa = 0.782) kabi dermatologik va endokrin tizim bilan bog'liq nojo'ya ta'sirlar ham nisbatan yuqori ehtimollik bilan prognoz qilindi. Shuningdek, *siydik rangining o'zgarishi* (Pa = 0.761), *titroq (shivering)* (Pa = 0.783) va *metgemoglobinemiya* (Pa = 0.737) kabi fiziologik va gematologik o'zgarishlar ehtimoli ham qayd etildi. Gastrointestinal tizim bilan bog'liq nojo'ya ta'sirlar ham prognoz natijalarida muhim o'rin egalladi. Jumladan, *oshqozon-ichak qon ketishi* (Pa = 0.687), *yashirin qon ketish (occult bleeding)* (Pa = 0.605), *peptik yara* (Pa = 0.517) va *oshqozon yarasi* (Pa = 0.495) kabi holatlar ehtimoliy klinik ta'sirlar sifatida aniqlangan. Bu esa birikmaning oshqozon-ichak shilliq qavati bilan bog'liq jarayonlarga ta'sir qilishi mumkinligini ko'rsatadi. Buyrak va siydik chiqarish tizimiga ta'sir qiluvchi ehtimoliy toksik ta'sirlar ham aniqlangan. Xususan, *gematuriya* (Pa = 0.642), *nefrit* (Pa = 0.592), *interstitsial nefrit* (Pa = 0.559) hamda *nefrotik sindrom* (Pa = 0.505) kabi patologik holatlar o'rtacha ehtimollik bilan prognoz qilindi. Bundan tashqari, jigar bilan bog'liq o'zgarishlar ham kuzatildi, jumladan *yog'li jigar (fatty liver)* (Pa = 0.514) va *gepatit* (Pa = 0.373). Bundan tashqari nevrologik va markaziy nerv tizimiga ta'sir qiluvchi ehtimoliy nojo'ya ta'sirlar, yurak-qon tomir tizimi bilan bog'liq ayrim ta'sirlar hamda toksikologik jihatdan muhim bo'lgan ayrim genetik va metabolik ta'sirlar ham aniqlangan bo'lib, ular past yoki o'rtacha ehtimollik bilan aniqlangan.

Tadqiq qilinayotgan birikmaning ehtimoliy saratonga qarshi faolligi PASS dasturi yordamida turli inson saraton va normal hujayra liniyalariga nisbatan baholandi. Natijalarga ko'ra, 4-metoksi-N-fenilbenzamid bir qator saraton hujayra liniyalariga nisbatan o'rtacha darajadagi potentsial sitotoksik faollik namoyon qilishi bashorat qilindi. Eng yuqori faollik ehtimoli Hs 683 (Pa = 0.499) hujayra liniyasida kuzatildi, bu esa moddaning miya o'smalaridan biri bo'lgan oligodendroglomaga qarshi potentsial ta'sir ko'rsatishi mumkinligini bildiradi. Shuningdek, yuqori bashorat qilingan faollik Kasumi-1 (Pa = 0.455) leykemiya hujayra liniyasida va NCI-H838 (Pa = 0.424) o'pka saratoni hujayra liniyasida ham aniqlandi. Bundan tashqari, ko'krak bezi saratoniga mansub MDA-MB-453 (Pa = 0.396) hamda melanoma hujayra liniyasi SK-MEL-1 (Pa = 0.360) uchun ham sezilarli darajadagi faollik ehtimoli kuzatildi.

Normal (saraton bo'lmagan) hujayra liniyalariga nisbatan bashorat qilingan faollik esa nisbatan past qiymatlarni ko'rsatdi. Jumladan, HUVEC hujayra liniyasida Pa = 0.230, HEK293 hujayra liniyasida Pa = 0.156 qiymatlari aniqlandi. Shuningdek, fibroblast hujayralari bo'lgan HS27 va WI-38 uchun ham nisbatan past faollik qiymatlari qayd etildi. Eng past faollik esa TERT-RPE1 hujayra liniyasida kuzatildi (Pa = 0.033). Olingan natijalar tadqiq qilinayotgan birikma saraton hujayralariga nisbatan selektiv sitotoksik ta'sirga ega bo'lishi mumkinligini, normal hujayralarga esa nisbatan past ta'sir ko'rsatishini ko'rsatadi. Shu sababli ushbu birikma kelgusida in vitro va in vivo sharoitlarda saratonga qarshi faol modda sifatida chuqurroq o'rganish uchun istiqbolli nomzod hisoblanadi.

Sintez qilingan 4-metoksi-N-fenilbenzamidning kemiruvchilarda organlarga xos kanserogenlikni (kemiruvchilarda organlarga xos o'sma rivojlanish ehtimoli) in silico bashorati ham PASS dasturida tekshirildi. Hisoblash natijalariga ko'ra, erkak kalamushlarda bir nechta organlarda o'rtacha darajadagi kanserogenlik ehtimoli aniqlandi. Eng yuqori Pa qiymati burun bo'shlig'i (Pa = 0.558) uchun qayd etildi. Shuningdek, buyrak (Pa = 0.551), siydik pufagi (Pa = 0.547) va oshqozon (Pa = 0.534) organlarida ham nisbatan yuqori ehtimollik kuzatildi. Urg'ochi kalamushlarda esa eng yuqori kanserogenlik ehtimoli siydik pufagi uchun kuzatildi (Pa = 0.649). Bu natija moddaning ushbu organ to'qimalarida o'sma rivojlanishiga olib kelish ehtimoli mavjudligini ko'rsatadi.

Erkak sichqonlarda ham bir qator organlarda kanserogenlik ehtimoli aniqlangan. Eng yuqori Pa qiymati yana siydik pufagi uchun kuzatildi (Pa = 0.694). Shuningdek, gematopoetik tizim (Pa = 0.512), quloq zimbal bezi (Pa = 0.466), burun bo'shlig'i (Pa = 0.450) va buyrak (Pa = 0.449) organlarida ham sezilarli ehtimollik qayd etildi. Urg'ochi sichqonlarda eng yuqori kanserogenlik ehtimoli siydik pufagi uchun aniqlangan (Pa = 0.737). Bundan tashqari, jigar (Pa = 0.359) va gematopoetik tizim (Pa = 0.364) uchun ham o'rtacha darajadagi ehtimollik qiymatlari qayd etildi.

PASS dasturi yordamida olingan natijalar tadqiq qilinayotgan birikma ayrim kemiruvchi organlarida o'sma rivojlanish ehtimolini ko'rsatishini bildiradi. Ayniqsa siydik pufagi barcha modellar (erkak va urg'ochi kalamush hamda sichqonlar) bo'yicha eng yuqori ehtimollik qiymatlarini ko'rsatdi.

**Xulosa.** PASS dasturi tomonidan bashorat qilingan biologik faollik spektrlarini tahlil qilishda eksperimental sinovlarning haqiqiy imkoniyatlarini hisobga olish kerak. Bu holda, umumiy tavsiya eng ehtimoldan eng kam ehtimolgacha bo'lgan turli xil bashorat qilingan biologik faollik turlarini ketma-ket o'rganishdir. Shuni ta'kidlash kerakki, PASS dasturi ma'lum bir birikmaning dori vositasiga aylanishini oldindan aytib bera olmaydi, chunki bu bir qator omillarga bog'liq. Biroq, bashorat qaysi biologik faollikni dastlab sinab ko'rish kerakligini va qaysi birikmalar kerakli faollik turlarini namoyish etish ehtimoli eng yuqori ekanligini aniqlashga yordam beradi. Olingan natijalar kelgusida ushbu birikmaning biologik va farmakologik xususiyatlarini eksperimental usullar orqali chuqurroq o'rganish zarurligini tasdiqlaydi.

#### ADABIYOTLAR

1. Filimonov D. A. et al. Prediction of the biological activity spectra of organic compounds using the PASS online web resource //Chemistry of Heterocyclic Compounds. – 2014. – T. 50. – №. 3. – C. 444-457.
2. Filimonov D. A. et al. Prediction of the biological activity spectra of organic compounds using the PASS online web resource //Chemistry of Heterocyclic Compounds. – 2014. – T. 50. – №. 3. – C. 444-457.
3. Lagunin A. A. et al. CLC-Pred: A freely available web-service for in silico prediction of human cell line cytotoxicity for drug-like compounds //PloS one. – 2018. – T. 13. – №. 1. – C. e0191838.
4. Muratov E. N. et al. A critical overview of computational approaches employed for COVID-19 drug discovery //Chemical Society Reviews. – 2021. – T. 50. – №. 16. – C. 9121-9151.
5. Poroikov V. V. et al. Computer-aided prediction of biological activity spectra for organic compounds: The possibilities and limitations //Russian Chemical Bulletin. – 2019. – T. 68. – №. 12. – C. 2143-2154.
6. Filimonov D. A. et al. Computer-aided prediction of biological activity spectra for chemical compounds: opportunities and limitations //Biomedical Chemistry: Research and Methods. – 2018. – T. 1. – №. 1. – C. e00004-e00004.
7. Palmacci V. et al. E-GuARD: expert-guided augmentation for the robust detection of compounds interfering with biological assays //Journal of Cheminformatics. – 2025. – T. 17. – №. 1. – C. 64.
8. Chandrababu S., Bastola D. A novel prediction model for discovering beneficial effects of natural compounds in drug repurposing //International Work-Conference on Bioinformatics and Biomedical Engineering. – Cham : Springer International Publishing, 2020. – C. 811-824.
9. Bo'riyeva D., Abdushukurov A. 4-Metoksibenzoy kislotaning anilin va toluidin izomerlari bilanreaksiyalari //«ACTA NUUZ». –2025. –T. 3. –№. 3.2. –C. 341-344.