



UDK: 615.19

Irodaxon MAMATOVA,
Andijon davlat tibbiyot instituti dotsenti, DSc,
E-mail: rrobia@inbox.ru

Andijon davlat universiteti dotsenti, DSc M.M.Xojimatov taqrizi asosida

B-KARIOFILLEN AJRATIB OLISH VA ULARNING KVANT KIMYOVIY TAHLILI

Annotatsiya

Maqolada β -kariofillen biologik faol moddasini "Sanjam" oziq-ovqat qo'shilmasi tarkibidan ajratib olish hamda uni IK spektroskopik tahlili natijalari keltirilgan.

Kalit so'zlar: β -kariofillen, "Sanjam" oziq ovqat qo'shilmasi, kvant kimyoviy hisoblash usullari.

ЭКСТРАКЦИЯ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ В-КАРИОФИЛЛЕНА

Аннотация

В статье представлены результаты выделения биологически активного вещества β -кariofillена из состава пищевой добавки "Санджам", а также его спектроскопического анализа ик.

Ключевые слова: β -кariofillен, пищевая добавка "Санджам", квантово-химические методы расчета.

B-CARIOPHYLLENE EXTRACTION AND THEIR QUANTUM CHEMICAL ANALYSIS

Annotation

The article presents the results of the separation of the biologically active substance β -caryophyllene from the composition of the food additive "Sanjam", as well as its spectroscopic analysis of ik.

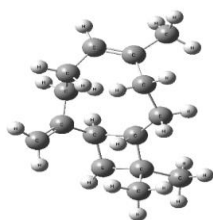
Key words: β -karyophyllene, "Sanjam" food additive, quantum chemical calculation methods.

Kirish. β -kariofillen 204.35 molekulyar massa va $C_{15}H_{24}$ molekulyar formulaga ega bo'lgan bitsiklik seskviterpen bo'lib (-)-trans-Caryophyllene nomi bilan ham tanilgan modda hisoblanadi. U indutsirlangan azot oksid sintazasi (iNOS), interleykin 1 beta (IL-1 β), Interleykin-6 (IL-6), o'sma nekrozi alfa faktori (TNF- α), yadro faktori (NF- κ B), siklooksigenaza 1 (SOG-1), siklooksigenaza 2 (SOG-2)lar faoliyatini pasaytirish xususiyati borligi bilan yallig'lanishga qarshi faollikga ega. β -caryophyllene qalampir (Piper nigrum L.), Rosmarinus officinalis, sinnamon (Cinnamomum spp.) tog' rayxon (Origanum vulgare L.) rayhon (Ocimum spp.), timyan (Thymus vulgaris), mavraq (Salvia officinalis), yalpiz (Mentha piperita), zanjabil (Zingiber officinale) [1-3] qayrag'och (Pinus), Chenopodium ambrosioides, nasha (Cannabis sativa) kabi juda ko'plab o'simliklar tarkibida uchraydi[4,5]. Ushbu moddaning terpevtik xususiyatlaridan kelib chiqib kelgusida farmatsevtik xususiyatlarini yanada chukkurroq urganish maksadida ushbu moddani ajratib olib kimyoviy tuzilishini o'rganishni oldimizga maqsad qilib oldik.

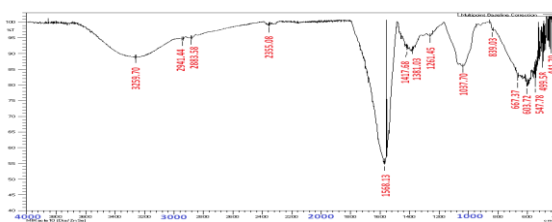
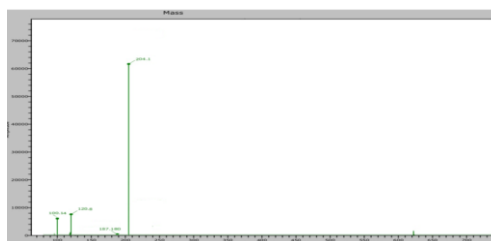
Tadqiqot metodologiyasi. "Sanjam" oziq-ovqat qo'shilmalari tarkibidan ajratib olingan a-pinen moddasining tuzilishini "Gaussian 98" dasturlar paketidan foydalanganholda kvant-kimyoviy hisoblash orqali amalga oshirildi. Buning uchunDFT/B3LYP gibrid metodi 3-21G bazisida kimyoviy strukturasio'rganilayotgan moddaning molekulyar tuzilishlari optimallashtirildi. Shuningdek, Hartri energiyalari, IQ-spektrlari hisoblab topildi."Builder" uskunalar bo'limining "Modify bond","Modify dihedral" kabimolekula quruvchilari moddaning molekulyar tuzilishlarini dasturgakiritishda foydalanildi. Molekulalarning strukturalarini optimallashtirish "Gaussian calculation setup" bo'limidagi"Job type" ning "Optimization", IQ-spektrlarini hisoblash esa "Frequency" buyruqlari yordamida amalga oshirildi. Hisoblash jarayonlari molekular uchun erituvchisiz, xloroform va dietilefir muhitida alohida-alohida amalga oshirildi. Erituvchilarni "Gaussian calculation setup" ning "solvation" bo'limi orqali tanlandi.

β -kariofillenni ajratib olish. 10 gramm "Oltin vodi" oziq-ovqat qo'shilmasidan olib uni 200 ml geksan bilan Sokslet apparatida ekstraksiya qilindi. Ekstraksiyadan so'ng erituvchi past bosimda rotor bug'latg'ich yordamida bug'lantirilib to'q ko'k rangli β -kariofillen kukuni olindi.

Tahlil va natijalari. Ajratib olingan β -kariofillenning tuzilishini o'rganish ham IQ-spektroskopik metoddan foydalanilgan holda tahlil qilindi. Bunda uning IQ-spektri yuqorida keltirilgan usul va spektrometr yordamida aniqlandi. Ajratib olingan β -kariofillenning eksperimentalnatijalari nazariy kvant-kimyoviy hisoblash natijalari bilan qiyosiy taqqoslangan holda tahlil qilindi.



1-rasm. β -kariofillenning optimallashtirilgan molekulyar tuzilishi.

2-rasm. β -kariofillenning IK-spektri.3-rasm. β -kariofillenning Mass-spektri.

Ajratib olingan β -kariofillenning tuzilishini qiyosiy tahlil qilish orqali aniqlash maqsadida, ushbu birikmaning molekulyar strukturasi tebranish (IQ) spektrlari Gaussian 98 kvant-kimyoviy hisoblash dasturining DFT/B3LYP metodi 3-21G bazisida optimallashtirilgan holda hisoblandi [6]. Birikmalarning eksperimental yo'l bilan aniqlangan va dastur yordamida nazariy hisoblangan tebranish spektrlari qiyosiy tahlil qilindi. Qiyosiy tahlil natijalari quyidagi 1-jadvalda keltirilgan.

1-jadval.

β -kariofillenning kvant kimyoviy xisoblangan va eksperimental aniqlangan IQ-spektroskopik analizlari natijalari.

	β -caryophyllene	
	Hisoblangan, sm ⁻¹	Aniqlangan, sm ⁻¹
$\delta_s(S-S)$ 1-halqada	600.79	603.72
$\delta_s(S-S)$ 1-halqada	655	667.37
$\delta(S-N)$ 1,2-halqada	1029	1037.70
$\delta_s(S-N)$ 1-halqada	1257.08	1261.45
$\delta_s(S-N)$ 1-halqada	1393	1381.03
$\delta_s(SN3)$ yon zanjir	1437.46	1417.68
N $\delta_s(S-N)$ 1-halqada	1564.28	1568.13
Vs (C-H)1-halqada	3203	3259.70

β -kariofillenning eksperimental yo'l bilan aniqlangan va hisoblangan IQ-spektrlaridagi yutilish cho'qqilari mos ravishda bir biriga juda yaqin ekanligi yuqoridagi jadvaldan ko'rinib turibdi. YA'ni β -kariofillenning 2 halqasidagi $>S=C<$ bog'larining hamda 1 va 2 halqalardagi S-N bog'larining deformatsion ($\delta_s(S-S)$, $\delta_s(S-S-S)$, $\delta_s(S-N)$) tebranishlariga xos bo'lgan yutilish cho'qqilari nazariy hisoblangan yutilish cho'qqilariga juda ham yaqin ekanligi aniqlanildi.

N

Ayniqsa 1chi halqa orasidagi S< bog'larining deformatsion tebranishlarga

N

xos bo'lgan yutilish cho'qqilari eksperimental yo'l bilan olingan IK spektri tahlili natijalarida ham mavjud ekanligi hamda hisoblash natijalariga (mos ravishda 1568.13 va 1564.28 sm⁻¹), yaqin ekanligini ko'rishimiz mumkin.

Xulosa va takliflar. Xulosa qilib aytadiganda, β -kariofillenning eksperimental yo'l orqali aniqlangan IQ-spektridagi yutilish cho'qqilari, nazariy kvant-kimyoviy hisoblangan yutilish cho'qqilariga mos keladi. Bu esa, aniqlanayotgan birikmalarning tuzilishi yuqorida keltirilgan β -kariofillenning kimyoviy stukturasi mos ekanligiga dalolat beradi. Shuningdek mass spektral analiz natijalari ham ularni ushbu moddaga tegishli ekanligini ko'rsatmoqda. YA'ni Mass-spektrda hosil bo'lgan 100.1 m/z, 120.6 m/z va 204.1 m/z pik cho'qqilar S8N4+, S9N12 va S15N24 ionlariga xos bo'lib ularni ushbu moddaga tegishli ekanligini ko'rsatdi.

ADABIYOTLAR

1. Plastina P., Apriantini A., Meijerink J., Witkamp R., Gabriele B., Fazio A. In Vitro Anti-Inflammatory and Radical Scavenging Properties of Chinotto (Citrus myrtifolia Raf.) Essential Oils. *Nutrients* 2018, 10, 783.
2. Machado K.D.C.; Islam M.T.; Ali E.S.; Rouf R.; Uddin, S.J.; Dev, S.; Shilpi J.A.; Shill M.C.; Reza H.M.; Das A.K.; et al. A systematic review on the neuroprotective perspectives of beta-caryophyllene. *Phytother. Res.* 2018, 32, 2376–2388.
3. Oliveira G.; Machado K.C.; Machado K.C.; da Silva A.; Feitosa, C.M.; de Castro Almeida F.R. Non-clinical toxicity of beta-caryophyllene, a dietary cannabinoid: Absence of adverse effects in female Swiss mice. *Regul. Toxicol. Pharmacol.* 2018, 92, 338–346.
4. Tundis R.; Iacopetta D.; Sinicropi M.S.; Bonesi M.; Leporini M.; Passalacqua N.G.; Ceramella J.; Menichini F.; Loizzo M.R. Assessment of antioxidant, antitumor and pro-apoptotic effects of *Salvia fruticosa* Mill. subsp. *thomasi* (Lacaita)

- Brullo, Guglielmo, Pavone & Terrasi (Lamiaceae). Food Chem. Toxicol. Int. J. Publ. Br. Ind. Biol. Res. Assoc. 2017, 106, 155–164.
5. Ruffo M., Parisi O.I., Scrivano L., Restuccia D., Amone, F., Sinicropi M.S., Malivindi R., Aiello G.; Puoci F. Role of Calabrian Black Rice in Metabolic Syndrome: In vitro Evaluation of *Oryza sativa* L. Indica Biological Properties. Curr. Nutr. Food Sci. 2018, 14, 121–127.
6. Mamatova Irodakon Yusupovna. (2022). To study the structure of avenacine a-1 and quercetine using ir-spectroscopic and quantum-chemical computational techniques and their antimycobacterial activity. <https://doi.org/10.5281/zenodo.6585392>.