QO‘QON DAVLAT PEDAGOGIKA INSTITUTI ILMIY XABARLARI
(2026-yil 5-son)

TABIIY FANLAR

NATURAL SCIENCES

https://doi.org/10.70728/a.series.tab.v08.i05.010

3,4,5-TRIMETOKSIBENZOY KISLOTANING IZOBUTIL EFIRI SINTEZI, BIOLOGIK FAOLLIGI

Abdumannopova Nasibaxon Baxodir qizi
O’zbekiston Milliy Universiteti 3-kurs talabasi
abdumannopovanasibaxon@gmail.com
Tel: +998932465545

Annotatsiya. 3,4,5-trimetoksibenzoy kislotaning izobutil spirti bilan eterifikatsiya reaksiyasi o‘rganildi va mos izobutil efiri olindi. Eterifikatsiya reaksiyaning borishiga harorat, reaksiya davomiyligi, katalizator tabiati ta’siri aniqlanib, murakkab efirni yuqori unum bilan sintez qilishning optimal sharoiti topildi. Sintez qilingan 3,4,5-trimetoksibenzoy kislota murakkab efirining fizik-kimyoviy va nazariy biologik faolligi p**ass online** dasturida o‘rganildi, tuzilishi IQ- va mass-spektrlari yordamida tasdiqlandi.

Kalit so‘zlar: 3,4,5-trimetoksi benzoy kislota, izobutil spirt, metoksi guruh, efirlar, biologik faollik, spazmolitik ta’sir

Аннотация. Была изучена реакция этерификации 3,4,5-триметоксибензойной кислоты с изобутиловым спиртом, в результате которой был получен соответствующий изобутиловый эфир. Определено влияние температуры, продолжительности реакции и природы катализатора на ход реакции этерификации, а также найдены оптимальные условия для синтеза сложного эфира с высоким выходом. Физико-химическая и теоретическая биологическая активность синтезированного сложного эфира 3,4,5-триметоксибензойной кислоты была изучена с помощью онлайн-программы, а его структура подтверждена с помощью ИК- и масс-спектрометрии.

Ключевые слова: 3,4,5-триметоксибензойная кислота, изобутиловый спирт, метоксигруппа, сложные эфиры, биологическая активность, спазмолитический эффект.

Abstract. The esterification reaction of 3,4,5-trimethoxybenzoic acid with isobutyl alcohol was studied, resulting in the corresponding isobutyl ether. The effects of temperature, reaction time, and the nature of the catalyst on the esterification reaction were determined, and optimal conditions for high-yield ester synthesis were found. The physicochemical and theoretical biological activity of the synthesized 3,4,5-trimethoxybenzoic acid ester were

studied using an online program, and its structure was confirmed using IR and mass spectrometry.

Key words: 3,4,5-trimethoxybenzoic acid, isobutyl alcohol, methoxy group, esters, biological activity, antispasmodic effect

KIRISH. 3,4,5-trimetoksibenzoy kislotaning murakkab efirlari kimyo, farmatsevtika va organik sintez sohalarida katta ahamiyatga ega. Ushbu moddaning murakkab efirlari turli biologik faollikka ega bo’lib, antibakterial, antifungal, yallig’lanishga qarshi, va hatto o’simta o’sishini to’xtatuvchi xususiyatlarga ega bo’lishi aniqlangan. Shu sababli, ular yangi dorivor preparatlarni ishlab chiqishda istiqbolli moddalardir. 3,4,5-trimetoksibenzoy kislotaning murakkab efirlari atir-upa, oziq-ovqat va plastmassa kabi sohalarda stabilizatorlar, xushbo’y moddalar yoki kimyoviy qo’shimchalar sifatida qo’llaniladi. Ularning sintezi ushbu mahsulotlarning sifatini oshiradi. Yangi sintez usullari va katalizatorlarning joriy etilishi ekologik xavfsizlikni ta’minlash, jarayonni arzonlashtirish va hosildorlikni oshirish imkonini beradi. Bu, ayniqsa, organik kimyo va farmatsevtika sohalarida muhimdir. Ushbu moddalarning sintez usullari va ularning xossalarini o’rganish organik kimyo va yangi materiallarni ishlab chiqishda muhim ahamiyatga ega bo’lib, ilmiy izlanishlar uchun dolzarb yo’nalish hisoblanadi.

ADABIYOTLAR TAHLILI VA METODLAR

Gal kislota (3,4,5-trigidroksibenzoy kislota) o‘simliklar olamida keng tarqalgan, kuchli antioksidant xususiyatlarga ega bo‘lgan past molekulyar massali fenol kislotadir [1, 2]. Ushbu birikma ilk bor 1785-yilda Karl Vilgelm Sheele tomonidan ajratib olingan bo‘lib, dastlab siyoh va bo‘yoq ishlab chiqarishda qo‘llanilgan. Gal kislota tabiatda choy barglari, eman po‘stlog‘i, anor mevasi, uzum urug‘lari, turli mevalar va boshqa ko‘plab o‘simliklarda erkin holda yoki gallotanninlar tarkibida mavjud [3-5]. Gal kislotaning alkil efirlari ya’ni alkil gallatlar uning eng ko‘p o‘rganilgan va amaliy ahamiyatga ega bo’lgan hosilalari hisoblanadi. Ular karboksil guruhiga spirtlar bilan eterifikatsiya qilish yo’li bilan olinadi. Klassik Fisher eterifikatsiyasi ya’ni kislota katalizatorligida spirt bilan qizdirish eng oddiy usul bo‘lishiga qaramay, unumdorlikni oshirish va reaksiya vaqtini kamaytirish maqsadida turli katalitik tizimlar va reaksiya sharoitlari taklif qilingan [6,7].

TAJRIBALAR QISMI.

Mahsulotlarning ba’zi fizik parametrlarini aniqlashda qo’llanilgan qurilmalarning xarakteristikasi: IK spektr natijalari IRAffininity-1S, Shimadzu corporation, 2020 Range: 350-7800 cm^{-1} qurilmasida, moddalarning tozaligi HPLC: LC-20 Prominence, Shimadzu corporation, Japan, 2020 Range: 190-600 nm.

Yumaloq tubli kolbaga 2,12 g (0,01 mol) 3,4,5-trimetoksibenzoy kislotasi solindi va erituvchi hamda reagent sifatida 28 ml (0,3 mol) izobutil spirti qo‘shildi. Aralashmaga katalizator sifatida 1 ml (0,018 mol) konsentrlangan sulfat kislota ehtiyotkorlik bilan tomizildi.

Reaksiya aralashmasi 6-7 soat davomida teskari sovutgich ostida (qayta oqimda) qizdirildi. Reaksiya borishi yupqa qatlam xromatografiyasi (YuQX) yordamida nazorat qilindi. Reaksiya yakunlangach, ortiqcha izobutil spirti vakuumda haydab yuborildi. Moddalarni qog’oz xromatografiya usulida tozalash va ajratib olindi. maxsulotni sof holda ajratib olish maqsadida ushbu usuldan foydalanildi. Sintez qilingan mahsulot xromatografik plastinkaning start chizig‘iga yaxlit chiziq ko‘rinishida shisha kapillyar yordamida surtildi. Plastinka (geksan:etilatsetat (3:2)) erituvchilar tizimi bo‘lgan xromatografik kameraga joylashtirildi. Erituvchi plastinkaning yuqori qismiga yetganda, jarayon to‘xtatildi va plastinka quritildi. Mahsulot yuqori qatlamda alohida zona ko‘rinishida ajraldiva shu qatlam ehtiyotkorlik bilan qirqib olindi. Qirqib olingan qatlamdagi mahsulot etilatsetat erituvchisi yordamida bir necha bor yuvish orqali ekstraksiya qilindi. Olingan elyuent filtrlanib tozalandi. Etilatsetat xona haroratida bug’latilgandan so‘ng, idish tubida efirning toza kristallari hosil bo‘ldi. Mahsulot unumi 80%.

3,4,5-Trimetoksibenzoy kislotaning izobutil efirining biologik faolligi va toksikologik xususiyatlarini PASS dasturi yordamida tahlil qilish.

Sintez qilingan 3,4,5-trimetoksibenzoy kislotaning izobutil efiri moddasining ehtimoliy biologik faolligi PASS (Prediction of Activity Spectra for Substances) kompyuter dasturi yordamida baholandi. PASS dasturi molekula strukturasi asosida biologik faoliyat spektrini bashorat qiladi va natijalarni Pa (faol bo‘lish ehtimoli) hamda Pi (faol bo‘lmaslik ehtimoli) ko‘rsatkichlari orqali ifodalaydi. Agar Pa > Pi bo‘lsa, moddaning ushbu biologik faoliyatga ega bo‘lish ehtimoli mavjud deb qaraladi.

3,4,5-trimetoksibenzoy kislotaning izobutil efiri uchun olingan ma’lumotlar shuni ko‘rsatadiki, modda bir-biriga bog‘liq bo‘lgan bir necha muhim farmakologik yo‘nalishlarda Pa > 0,8 ko‘rsatkichiga ega. Quyida ushbu faolliklarning ilmiy tahlili keltiriladi: Spazmolitik faollik (Papaverin-like effect) PASS tahliliga ko‘ra, moddaning eng yuqori ko‘rsatkichlaridan biri bu papaveringa o‘xshash spazmolitik ta’sirdir (Pa=0,854). Kimyoviy nuqtai nazardan, bu 3,4,5-trimetoksibenzoy kislotasi fragmentining molekula tarkibida mavjudligi bilan izohlanadi. Ma’lumki, papaverin ham o‘z tarkibida metoksi guruhi tutgan benzol halqalarini saqlaydi. Izobutil efirining bu xususiyati silliq mushak hujayralaridagi fosfodiefiraza fermentini ingibirlash yoki kalsiy kanallarini bloklash orqali miotrop spazmolitik effekt berishidan dalolat beradi. Bu esa moddani qon tomirlar va ichki a’zolar spazmlari bilan bog‘liq patologiyalarni davolashda istiqbolli birikma sifatida ko‘rsatadi.

Ubiquinol-cytochrome-c reductase ingibitorligi. Moddaning ushbu ferment tizimiga ta’siri (Pa=0,854) uning hujayra bioenergetikasiga aralashish qobiliyatini ko'rsatadi. Mitoxondriyal nafas olish zanjirining III kompleksi hisoblangan ushbu fermentning bloklanishi patologik (masalan, o'simta) hujayralarning energiya almashinuvini buzadi. Izobutil radikalining tarmoqlangan zanjiri moddaning lipofilligini oshirib, uning mitoxondriya

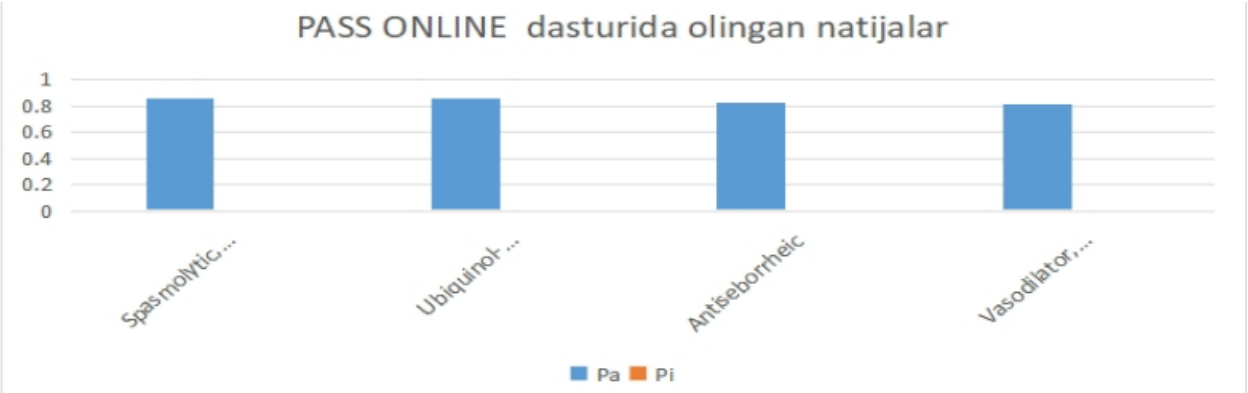
membranalaridan oson o‘tishini va fermentning faol markazi bilan samarali bog‘lanishini ta’minlashi taxmin qilinadi. Bu natija moddaning sitotoksik va antitumor xususiyatlarini chuqurroq o‘rganish uchun ilmiy asos bo‘ladi.

Antiseborreik (*Antiseborrheic*) xususiyat. Dermatologik yo‘nalishda modda Pa=0,821 ehtimollik bilan yuqori faollik namoyon etdi. Bu ko‘rsatkich moddaning teri yog‘ bezlari (sebotsitlar) metabolizmiga ta’sir ko‘rsatish qobiliyatini anglatadi. Izobutil efiri efiraza fermentlari ta’sirida sekin gidrolizlanishi natijasida teri qatlamlarida uzoq vaqt saqlanib qolishi va mahalliy ta’sir ko‘rsatishi mumkin. Ushbu xususiyat modda asosida teri kasalliklariga qarshi yangi tashqi qo‘llaniluvchi dori shakllarini yaratish imkonini beradi.

Koronar qon tomirlarni kengaytirish (*Vasodilator, coronary*) faolligi. Kardiologik yo‘nalishda modda Pa=0,809 ko‘rsatkichi bilan koronar vazodilatatorlik xususiyatini ko‘rsatdi. Bu moddaning miokardni qon bilan ta’minlanishini yaxshilash va yurakning kislorodga bo‘lgan ehtiyojini optimallashtirish imkoniyatini bildiradi. Strukturadagi trimetoksibenzoy kislotasi qoldig‘i ko‘plab kardiologik dori vositalarining (masalan, trimetazidin kabi) asosi bo‘lgani sababli, izobutil efirining ushbu yo‘nalishdagi faolligi qonuniyatli va ilmiy asoslangan hisoblanadi.

PASS Online dasturi orqali o‘tkazilgan tahlillar shuni ko‘rsatadiki, 3,4,5-trimetoksibenzoy kislotaning izobutil efiri keng farmakologik spektrga ega birikmadir. Ayniqsa, uning spazmolitik va mitoxondriyal fermentlar faoliyatiga ta’siri yuqori ishonchlilik darajasiga ega. Izobutil radikalining molekula tarkibiga kiritilishi uning gidrofobligini muvozanatlashtirib, biologik nishonlar bilan o‘zaro ta’sirini optimallashtirgan.

1- **jadval**



TAHLIL VA NATIJALAR

3,4,5-trimetoksibenzoy kislotaning izobutil efiri uchun IK spektrida 2958,80 sm^{-1} dagi yutilish izobutil fragmentidagi alifatik C-H bog'larining asimmetrik valent tebranishlariga mos keladi. Bu chiziq molekulada tarmoqlangan alkil zanjir mavjudligini ko'rsatadi va murakkab efirning spirt qismi sifatida izobutil radikalining ishtirokini tasdiqlaydi. 2933,73 sm^{-1} dagi yutilish ham alifatik C-H valent tebranishlari bilan bog'liq bo'lib, izobutil guruhidagi metilen va

metil fragmentlari hissasini aks ettiradi. U 2958,80 sm^{-1} dagi chiziq bilan birgalikda alkil qoldiqning spektral tasdig'i sifatida qaraladi. 2873,94 sm-1 dagi yutilish esa alifatik C-H bog'larining simmetrik valent tebranishlari bilan izohlanadi. Ushbu signal izobutil fragmentdagi CH_3 guruhlari tebranishlari bilan bog'liq bo'lib, yuqoridagi alifatik yutilishlar bilan birga molekuladagi to'yingan uglevodorod qismi mavjudligini aniq ko'rsatadi. 1718,58 sm^{-1} dagi kuchli va aniq yutilish murakkab efir karbonil guruhining C=O valent tebranishiga xosdir. Mazkur chiziq spektrning eng muhim diagnostik belgilaridan biri bo'lib, benzoat tipidagi efir hosil bo'lganini ko'rsatadi. Aromatik yadro bilan kon'yugatsiya hamda metoksi guruhlarning elektron ta'siri natijasida karbonil yutilishining pozitsiyasi klassik alifatik efirlarga nisbatan bir oz pastroq sohaga siljigan bo'lishi mumkin. 1591,27 sm^{-1} dagi chiziq aromatik halqa skeletidagi C=C valent tebranishlariga mos keladi. Bu yutilish trimetoksifenil yadroning saqlanib qolganini va molekulada aromatik tizim mavjudligini tasdiqlaydi. 1504,48 sm^{-1} dagi yutilish ham aromatik halqaning skelet tebranishlariga xos bo'lib, 1591,27 sm^{-1} dagi chiziq bilan birgalikda aromatik yadro mavjudligini ishonchli ko'rsatadi. Ushbu ikki signalning birgalikda kuzatilishi trimetoksi bilan almashgan benzol halqasiga mos keladi. 1463,97 sm^{-1} dagi yutilish metilen va metil guruhlarining deformatsion tebranishlari bilan bog'liq. Bu chiziq izobutil zanjiridagi CH_2 va CH_3 fragmentlari hissasi bilan izohlanadi hamda alifatik qismning strukturaviy tasdig'i hisoblanadi. 1417,68 sm^{-1} dagi yutilish aromatik yadroga ulangan metoksi guruhlarining ichki tebranishlari hamda qisman alifatik guruhlar deformatsion tebranishlari bilan bog'liq bo'lishi mumkin. Bu soha metoksi bilan boyigan aromatik tizimlar uchun xarakterli bo'lib, substituentlarning halqaga kislorod orqali ulanganini ko'rsatadi. 1379,10 sm^{-1} dagi chiziq alifatik metil guruhlarining simmetrik deformatsion tebranishlariga mos keladi. Izobutil radikalning tarmoqlangan tuzilishi ushbu sohada yutilish paydo bo'lishiga sabab bo'ladi va alifatik qismning mavjudligini yana bir bor tasdiqlaydi. 1334,74 sm^{-1} dagi chiziq aromatik metoksi guruhlaridagi C-O valent tebranishlari uchun xosdir. Shuningdek, u O-CH_3 guruhining tebranishlari bilan ham bog'liq bo'lib, trimetoksi almashinishga mos diagnostik belgi hisoblanadi. 1224,80 sm^{-1} dagi kuchli yutilish aromatik metoksi guruhlari va efir fragmentidagi C-O bog'larining valent tebranishlariga xosdir. Aynan shu soha trimetoksibenzoy hosilalari uchun eng muhim fingerprint zonalardan biri hisoblanadi, chunki bu yerda bir nechta kislorodli funksional guruhlarning tebranishlari ustma-ust tushadi. 1130,29 sm^{-1} dagi yutilish murakkab efir va aromatik metoksi fragmentlaridagi C-O valent tebranishlarining muhim belgisidir. Mazkur chiziqning intensivligi molekuladagi bir nechta C-O bog'lari mavjudligi bilan izohlanadi va u 1334,74 hamda 1224,80 sm^{-1} dagi yutilishlar bilan birgalikda trimetoksi-efir tabiatni yaxshi tavsiflaydi. 1070,49 sm^{-1} dagi chiziq C-O-C valent tebranishlari hamda aromatik halqa bilan bog'langan metoksi guruhlar tebranishlari bilan izohlanadi. U fingerprint sohaning muhim tarkibiy qismi bo'lib, metoksi guruhlar sonining ko'pligi sababli yetarlicha yaqqol namoyon bo'ladi. 1041,56 sm^{-1} dagi yutilish metoksi va efir fragmentlari tarkibidagi C-O

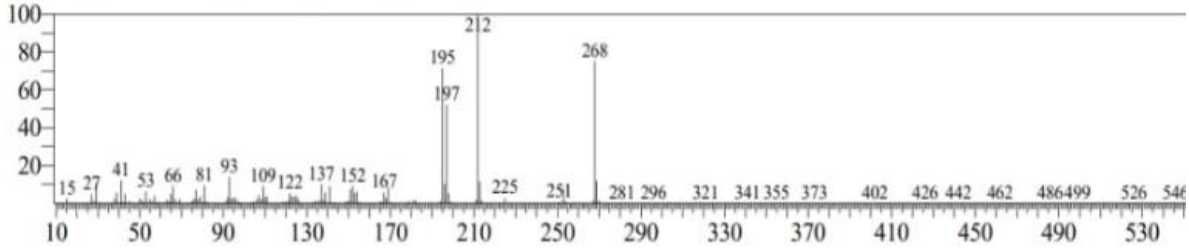
hamda C-O-C tebranishlari bilan bog'liq. Bu chiziq molekulada kislorod tutuvchi funksional guruhlarning ko'pligini tasdiqlaydi va 1130,29 hamda 1070,49 sm-1 dagi signallar bilan uyg'un holda namoyon bo'ladi. 1006,84 sm^{-1} dagi yutilish aromatik halqadagi C-H tekislik ichidagi deformatsion tebranishlar hamda C-O tebranishlari bilan bog'liq. Bu chiziq substitutsiyalangan aromatik tizim uchun qo'shimcha tasdiqlovchi belgidir. 952,84 sm^{-1} dagi chiziq aromatik tizim va kislorodli substituentlarga ega halqaning quyi chastotali deformatsion tebranishlari bilan izohlanadi. 900,76 sm^{-1} dagi yutilish aromatik halqadagi C-H deformatsion tebranishlari hamda substitutsiyalangan benzol tizimining qo'shimcha spektral belgisi sifatida qaraladi. Bu signal 952,84 va 846,75 sm^{-1} dagi chiziqlar bilan birgalikda aromatik qismning quyi chastotali tasvirini hosil qiladi. 846,75 sm^{-1} dagi yutilish aromatik C-H bog'larining tekislikdan tashqari deformatsion tebranishlariga mos keladi. Bu chiziq substitutsiyalangan benzol halqasi mavjudligini ko'rsatadi va 3,4,5-trimetoksi almashinishli aromatik tizim uchun muhim quyi chastotali belgilar sirasiga kiradi. 769,60 sm^{-1} dagi intensiv yutilish aromatik yadroning tekislikdan tashqari deformatsion tebranishlari bilan bog'liq bo'lib, halqaning substitutsiyalangan tuzilishini qo'llab-quvvatlaydi. Bunday signal aromatik skeletning saqlanganini ko'rsatuvchi muhim belgilardan biridir. 734,88 sm^{-1} dagi yutilish ham aromatik C-H tekislikdan tashqari deformatsion tebranishlariga xos bo'lib, aromatik fragment mavjudligining yana bir muhim belgisi hisoblanadi. U 769,60 sm^{-1} dagi chiziq bilan birga halqa substitutsiyalanganligini ko'rsatadi. 559,36 sm^{-1} dagi past chastotali yutilish aromatik yadroning skelet deformatsion tebranishlari hamda C-O bog'lari ishtirokidagi murakkab buralish tebranishlari bilan izohlanadi. Bu signal quyi chastotali zona uchun yordamchi diagnostik belgi sifatida ahamiyatga ega. 524,64 sm^{-1} dagi yutilish past chastotali sohada kuzatiladigan qo'shimcha skelet deformatsion tebranish bo'lib, molekulaning umumiy aromatik-kislorodli karkasiga mos keladi. 516,92 sm^{-1} dagi chiziq ham skelet tebranishlari sohasiga mansub bo'lib, aromatik yadro va kislorod tutuvchi substituentlarning past chastotali kollektiv tebranishlari bilan bog'liq. Ushbu past chastotali signallar birgalikda molekulaning murakkab aromatik-kislorodli tabiati bilan mos tushadi.

Umuman olganda, infraqizil spektrda alifatik C-H, kuchli efir karbonili C=O, aromatik C=C hamda ko'p sonli C-O va C-O-C tebranish chiziqlarining mavjudligi 3,4,5-trimetoksi bilan almashgan aromatik murakkab efir tuzilishiga mos keladi.

3,4,5-trimetoksibenzoy kislotaning izobutil efiri tarkibi gaz xromatografiya–mass-spektrometriya (GX-MS) usuli yordamida o‘rganildi. Xromatogrammada asosiy komponentga mos keluvchi yutilish vaqti 23.475 minut atrofida kuzatildi. Mazkur yutilish uchun olingan mass-spektr NIST kutubxonasi ma’lumotlari bilan solishtirilganda, u 3,4,5-trimetoksibenzoy kislotaning hosilasi, xususan uning butil efiri bilan mos kelishi aniqlandi.

Mass-spektrda molekulyar ion sifatida m/z = 268 qiymat kuzatildi, bu esa birikmaning molekulyar massasiga ($C_{14}H_{20}O_5$) mos keladi va namunada aynan butil efir hosil bo‘lganini

tasdiqlaydi. Shu bilan birga, spektrda m/z = 212 qiymatdagi eng intensiv (base peak) signal qayd etildi, bu esa molekuladan butil radikalining ajralishi natijasida hosil bo‘lgan fragment ion ekanligini ko‘rsatadi. Elektron zarbasi ta’sirida molekula ionlanib, keyinchalik barqaror fragment ionlarga parchalanadi. Fragmentatsiya jarayoni asosan efir bog‘ining uzilishi, metoksi guruhlarning ketma-ket ajralishi hamda aromatik yadroning rezonans orqali barqarorlashuvi bilan tavsiflanadi. Mass-spektrda kuzatilgan asosiy fragment ionlarni quyidagicha izohlash mumkin: m/z = 268 – molekulyar ion $[M]^+$ bo‘lib, 3,4,5-trimetoksibenzoy kislotaning butil efiriga tegishli. m/z = 212 – eng intensiv pik (base peak) bo‘lib, molekuladan butil radikali (C_4H_9, 56 birlik) ajralishi natijasida hosil bo‘ladi. Bu fragment 3,4,5-trimetoksibenzoy kationiga mos keladi. m/z = 197 – 212 fragmentdan metil radikali ($–CH_3$) ajralishi natijasida hosil bo‘ladi, bu metoksi guruhlarning mavjudligini tasdiqlaydi. m/z = 195 – molekuladan kislorod saqlovchi kichik fragment ($–OH$ yoki $–OCH_3$) ajralishi natijasida hosil bo‘lib, aromatik kislotaga xos parchalanishni ifodalaydi. m/z = 167 – metoksi guruhlarning ketma-ket ajralishi natijasida hosil bo‘lgan barqaror aromatik fragment ion hisoblanadi. m/z = 152 – aromatik yadroning yanada soddalashgan fragmenti bo‘lib, kislorodli substituentlarning yo‘qolishi bilan bog‘liq. m/z = 137 – rezonans orqali barqarorlashgan aromatik kation bo‘lib, trimetoksi tizimlar uchun xosdir. m/z = 122 va 109 – aromatik halqaning kislorod saqlovchi oraliq fragmentlari bo‘lib, metoksi guruhlarning bosqichma-bosqich ajralishini aks ettiradi. m/z = 93 – fenoksi tipidagi ($C_6H_5O^+$) fragment bo‘lib, aromatik halqada kislorod atomining mavjudligini tasdiqlaydi. m/z = 81 va 66 – aromatik yadroning chuqur parchalanishi natijasida hosil bo‘lgan kichik barqaror ionlardir. m/z = 53, 41 va 27 – alifatik fragmentlar bo‘lib, butil zanjirining parchalanishi natijasida hosil bo‘ladi. m/z = 15 – metil kationi (CH_3^+) bo‘lib, metoksi guruhlarning mavjudligini yana bir bor tasdiqlaydi.



1-rasm. 3,4,5-trimetoksibenzoy kislota izobutil efirining mass-spektri

Shuni ta’kidlash lozimki, spektrda m/z = 225, 251, 281 va undan yuqori qiymatli ayrim signallar ham kuzatiladi, biroq ular asosiy moddaning aniq bo’lakli mahsulotlari hisoblanmaydi. Bunday yutilishlar odatda fon signallari, iz aralashmalar yoki ikkilamchi fragmentatsiya jarayonlari bilan izohlanadi. Umuman olganda, molekulyar ionning m/z = 268 qiymatda kuzatilishi hamda 212, 197, 195, 167, 152, 137 va 93 kabi xarakterli fragment ionlarning mavjudligi 3,4,5-trimetoksi bilan almashgan aromatik benzoatlarning izobutil efiri tuzilishiga to‘liq mos keladi.

XULOSA.

Adabiyotlar tahlili asosida 3,4,5-trimetoksibenzoyi kislota hosilalari saraton, yallig‘lanish, infeksion va metabolik kasalliklarga qarshi kurash jarayonida yuqori natijalarni namoyon etishi, ayniqsa, alkil gallatlar va metallokomplekslar o‘sma rivojlanishiga qarshi va antimikrob faolligi bilan, alkil gallatlar orasida o‘rta zanjirli birikmalar (geksil va oktil gallatlar) eng yuqori biologik faollikni namoyon qilishi va bu ularning optimal lipofillik darajasi va hujayra membranasidan o‘tish xususiyati bilan bevosita bog‘liqligi ko‘rsatilgan.

Eterifikatsiya reaksiyasi davomida olingan 3,4,5-trimetoksibenzoyi kislotaning izobutil efirining yangi murakkab efiri tuzilishi ilk bor xrmaoto-mass va IQ-spektorlari yordamida tahlil qilindi va isbotlandi. 3,4,5-trimetoksibenzoyi kislotaning izobutil efiri PASS online dasturi orqali tekshrilganda spazmolitik va mitoxondriyal fermentlarda ta’siri yuqori bo‘lib funktsiyasi jihatidan papaveringa o‘xshash spazmolitik (Pa=0,854) xususiyati mavjudligi ko ‘rsatildi. Izobutil efirining bu xususiyati silliq mushak hujayralaridagi fosfodiefiraza fermentini ingibirlash yoki kalsiy kanallarini bloklash orqali miotrop spazmolitik effekt berishidan dalolat beradi. Kimyoviy nuqtai nazardan, 3,4,5-trimetoksibenzoy kislotasi fragmentining molekula tarkibida papaverin kabi metoksi guruhi tutgan benzol halqasi saqlashi bilan izohlandi.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. Silva RHN et al. Molecular Modeling and In Vitro Evaluation of Piplartine Analogs against Oral Squamous Cell Carcinoma. Molecules. 2023;28:1675. doi:10.3390/molecules28041675.

2. Boaventura MAD et al. Acetylcholinefirase inhibition and antimicrobial activity of hydroxyl amides synthesized from natural products derivatives. An Acad Bras Cienc. 2018;90:1945–1954. doi:10.1590/0001-3765201820170451.

3. Kaur R et al. Synthesis of substituted gallic acid peptide derivatives and evaluation of biological activities. Int J Pharm Sci Rev Res. 2014;28:16–21.

4. Braconi L et al. New Dual P-Glycoprotein and hCA XII Inhibitors as MDR Reversers in Cancer Cells. J Med Chem. 2022;65:14655–14672. doi:10.1021/acs.jmedchem.2c01175.

5. Dilweg MA et al. Exploring novel dilazep derivatives as hENT1 inhibitors. Purinergic Signal. 2025;21:289–316. doi:10.1007/s11302-024-10026-x.

6. Locatelli C. va boshqalar. Klinikgacha bo'lgan melanoma sichqoncha modelida tetradesil gallatning antimetastatik faolligi va past tizimli toksikligi // Yangi tadqiqot dorilari. – 2012. – T. 30. – № 3. – 870-879-betlar..

7. Choubey S., Varughese L. R., Kumar V., Beniwal V. Medicinal importance of gallic acid and its efir derivatives: a patent review // Pharmaceutical Patent Analyst. – 2015. – Vol. 4, № 4. – P. 305-315.