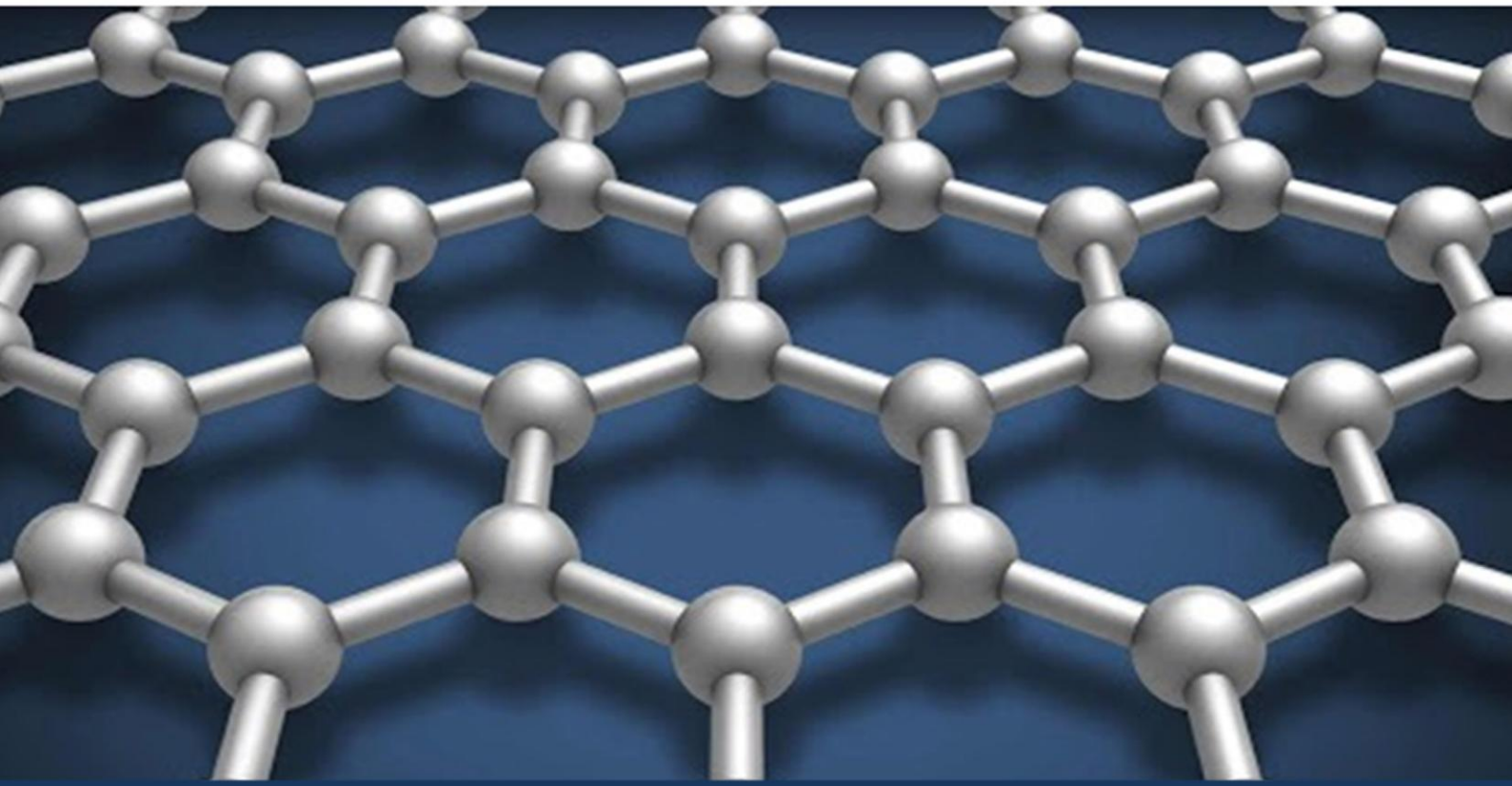
ISSN 2091-5527
№ 3/2026

O‘zbekiston

Kompozitsion Materiallar

Ilmiy-texnikaviy va amaliy jurnali



Узбекский научно-технический и производственный журнал

Композиционные материалы

UDK 547.96: 547-386

KOLLAGEN VA INULIN KOMPOZITSIYASINI MOLEKULYAR MODELLASHTIRILISHDA STRUKTURAVIY XUSUSIYATLAR

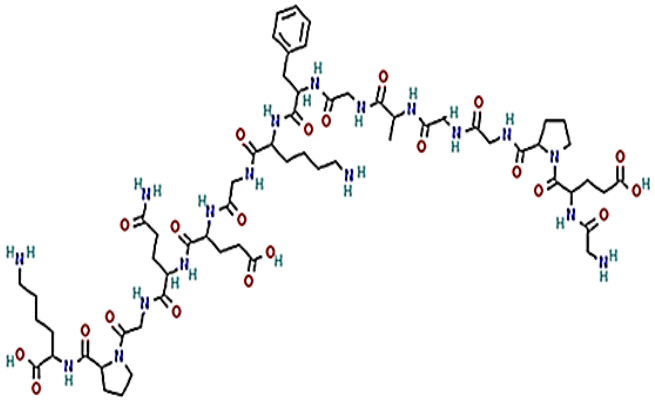
[1]Radjabov Otabek Iskandarovich, [2]Muinova Nigina Baxtiyorovna, [1]Azimova Luiza Baxtiyarovna, [1]Filatova Albina Vasilevna, [1]Turaev Abbosxon Sobirxonovich

[1]O‘zR FA Bioorganik kimyo instituti, [2]Toshkent kimyo texnologiya instituti

Annotatsiya. Ushbu maqolada qoramol terisidan ajratib olingan I tip kollagen hamda topinambur (*Helianthus tuberosus L.*) ildiz tugunaklaridan ajratib olingan inulin o‘rtasidagi molekulyar o‘zaro ta’sirlar molekulyar docking usuli yordamida o‘rganildi. Kollagen va inulin molekulalari o‘rtasidagi bog‘lanish energiyasi, faol bog‘lanish markazlari hamda aminokislota qoldiqlarining ishtiroki aniqlandi. Molekulyar docking natijalari kollagen:inulin tizimida bir nechta energetik jihatdan qulay bog‘lanish markazlari mavjudligi, eng barqaror kompleks C4 konfiguratsiyasida kuzatilib, docking energiyasi -5,9 kkal/mol ni tashkil etdi. Ushbu holatda GLN10, ARG11, GLY12, GLU13, ARG14, GLY15, PHE16 va PRO17 aminokislota qoldiqlari inulin bilan o‘zaro ta’sirlashuvi aniqlandi. Olingan natijalar kollagen:inulin kompozitsiyani farmatsevtika, biotibbiyot va oziq-ovqat sanoatida funksional biomateriallar ishlab chiqish uchun ilmiy asos bo‘lib xizmat qiladi.

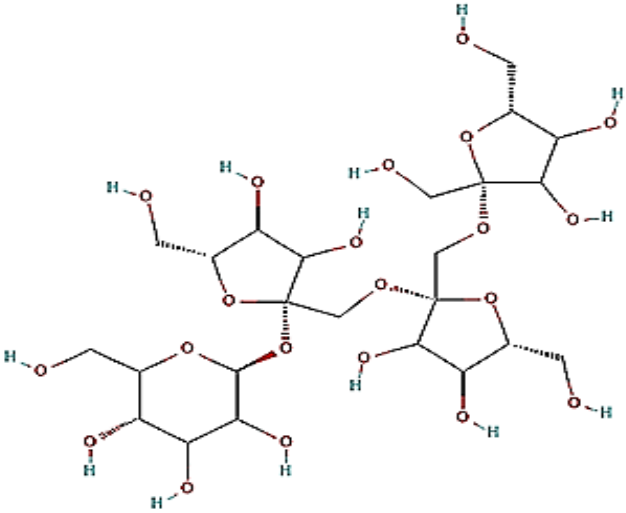
Kalit so‘zlar: kollagen, inulin, topinambur, molekulyar docking, kompleks

Kirish. Kollagen biologik to‘qimalarning asosiy strukturaviy oqsillaridan biri bo‘lib, sutemizuvchilar organizmidagi umumiy oqsil massasining taxminan 25-30% tashkil qiladi. Ayniqsa, I tip kollagen teri, pay va suyak to‘qimalarida keng tarqalgan bo‘lib, yuqori mexanik mustahkamlik va biologik moslikka ega [1]. So‘nggi yillarda kollagen asosidagi biomateriallar regenerativ tibbiyot, dori tashuvchi tizimlar va yara qoplamalari ishlab chiqishda keng qo‘llanilmoqda [2]. Kollagenning biologik xossalarini yaxshilash maqsadida uni tabiiy polisaxaridlar bilan modifikatsiyalash muhim ilmiy yo‘nalishlardan biri hisoblanadi. Polisaxaridlar kollagenning gidrofilligini, elastikligini va biologik faolligini oshirishi aniqlangan [3].



1-rasm. I tip kollagen tarkibidagi aminokislotalar ketma-ketligi

Inulin esa β-(2→1) bog‘lar orqali bog‘langan fruktoza qoldiqlaridan tashkil topgan tabiiy fruktan bo‘lib, prebiotik va biofaol xususiyatlarga ega. Topinambur tugunaklari inulinning asosiy tabiiy manbalaridan biri hisoblanadi. Ushbu o‘simlik tarkibida 60-80% gacha inulin mavjudligi qayd etilgan. Inulin suvda yaxshi erishi, zaharli emasligi va biologik parchalanishi sababli oziq-ovqat sanoatida va tibbiyotda keng qo‘llanmoqda [4, 5].



2-rasm. Inulin molekulasining tuzilishi

Molekulyar docking biomolekulalar o‘rtasidagi o‘zaro ta’sirlarni modellashtirishda samarali hisoblash usullaridan biri hisoblanadi. Ushbu usul ligand va makromolekula orasidagi eng barqaror konformatsiyani hamda bog‘lanish energiyasini aniqlash imkonini beradi [6]. AutoDock Vina dasturi yuqori aniqlikdagi docking natijalari berishi bilan biomolekulyar tadqiqotlarda keng qo‘llaniladi [7].

Kollagen-polisaxarid tizimlarida aminokislotalarning faol roli mavjud. Ayniqsa, arginin, glitsin va glutamin qoldiqlari vodorod bog‘lari hosil qilishda muhim ahamiyatga ega [8]. Mazkur aminokislotalar polisaxaridlarning gidroksil guruhlari bilan elektrostatik va vodorod bog‘lari hosil qilishi natijasida kompozitsiyaning barqarorligi oshadi.

Tadqiqot maqsadi. Qoramol terisidan ajratib olingan I tip kollagen hamda topinambur ildiz tugunaklaridan olingan inulin molekulalari o‘rtasidagi o‘zaro ta’sirlarni molekulyar docking usuli yordamida o‘rganish, ularning bog‘lanish energiyasini, faol markazlarini va aminokislota qoldiqlarining ishtirokini aniqlashdan iborat.

Materiallar va metodlar. *Tadqiqot obyekti* sifatida Tadqiqot ob’yekti sifatida qoramol terisidan ishqoriy-tuzli gidrolizlab olingan I tip kollagen strukturasi va topinambur inulini strukturasi ligand sifatida olingan.

Kollagen va inulin molekulyar modellarini tayyorlash. Tadqiqotda I tip kollagenning uch spiral tuzilmasi Protein Data Bank (PDB) bazasidan olingan struktura modeli asosida qo‘llanildi. Molekulyar modellashtirish jarayonida kollagen molekulasining barcha vodorod atomlari qo‘shildi hamda struktura energetik minimallashtirish orqali barqaror holatga keltirildi. Oqartirilmagan suv muhitini modellashtirish maqsadida fiziologik sharoitga mos ionlashgan holat hisobga olindi. Inulin molekulasi optimallashtirilgan holda ligand sifatida qo‘llanildi. Docking jarayonida grid box o‘lchami 24×24×24 Å etib tanlandi. Komplekslarning bog‘lanish energiyasi kkal/mol birligida baholandi. Hosil bo‘lgan komplekslarning vizualizatsiyasi Discovery Studio Visualizer dasturida bajarildi [9].

Termodinamik baholash. Bog‘lanish jarayonining barqarorligi erkin energiya qiymatlari orqali baholandi. AutoDock Vina tomonidan hisoblangan Vina score qiymatlari ligand va retseptor o‘rtasidagi o‘zaro ta’sir intensivligini ifodalovchi nisbiy ko‘rsatkich sifatida qabul qilindi. Eng past energiya qiymatiga ega kompleks eng barqaror tizim sifatida qaraldi.

Statistik va taqqoslash. Olingan natijalar mavjud ilmiy adabiyotlar bilan solishtirilib, tadqiqot natijalarining ishonchliligini oshirish hamda ularni xalqaro ilmiy kontekstga moslashtirish imkonini berdi.

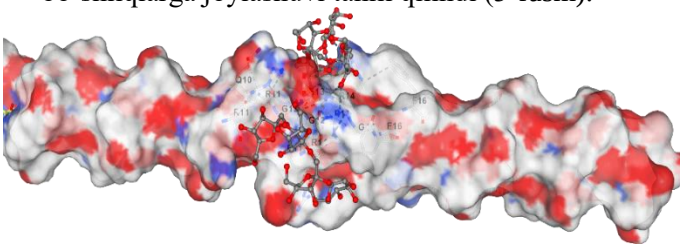
Natijalar va ularning muhokamasi. Kollagen va inulin o‘rtasida bir nechta energetik jihatdan qulay bog‘lanish konfiguratsiyalari kuzatildi (1-jadval).

1-jadval

Kollagen:inulin tizimi uchun molekulyar doking natijalari

CurPocket identifikatori	Vina hisobi	Bo'shliq hajmi (Å^3)	Markaz (x, y, z)	Kontakt qoldiqlari
C4	-5.9	16	-13, 9, 12	Chain A: GLN10 ARG11 GLY12 GLU13 ARG14 GLY15 PHE16 PRO17 Chain B: ARG11 ARG14 Chain C: ARG11 GLY12 GLU13 GLY15 PHE16
C2	-5.7	22	3, 14, 9	Chain A: ARG11 GLY12 GLU13 GLY15 PHE16 Chain B: GLN10 ARG11 GLY12 GLU13 ARG14 GLY15 PHE16 PRO17 Chain C: PRO7 GLY9 GLN10 ARG11 GLY12 GLU13 ARG14
C5	-5.7	14	-2, 13, 15	Chain A: GLY9 GLN10 ARG11 GLY12 GLU13 ARG14 GLY15 PHE16 PRO17 Chain B: GLY9 GLN10 ARG11 GLY12 GLU13 ARG14 GLY15 PHE16 PRO17 Chain C: ARG11 GLU13 PHE16
C1	-5.1	23	-4, 5, 12	Chain A: GLN10 ARG11 GLY12 GLU13 ARG14 GLY15 PHE16 PRO17 Chain B: ARG11 ARG14 Chain C: GLY12 GLU13 GLY15 PHE16

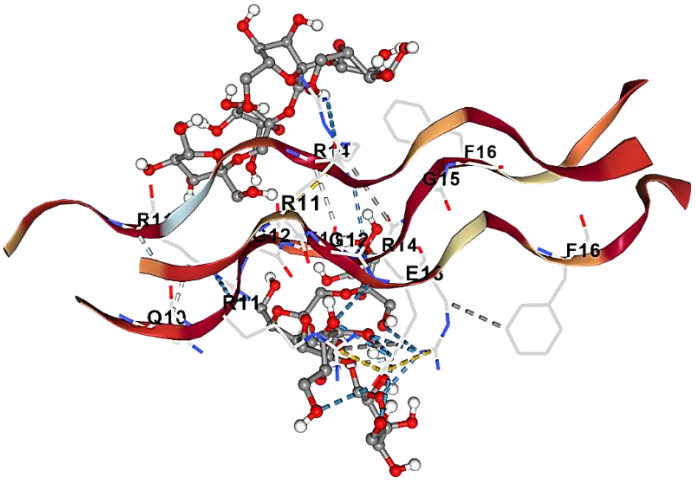
Eng past docking energiyasi C4 hududida aniqlanib, -5,9 kkal/mol ni tashkil etdi. Ushbu holatda GLN10, ARG11, GLY12, GLU13, ARG14, GLY15, PHE16 va PRO17 aminokislota qoldiqlari inulin bilan faol o‘zaro ta’sir hosil qilgan. C2 va C5 konfiguratsiyalarida mos ravishda -5,7 kkal/mol energiya kuzatildi. Bu qiymatlar kollagen:inulin tizimining termodinamik jihatdan barqarorligini ko‘rsatadi. C1 hududida docking energiyasi mos ravishda -5,1 kkal/mol bo‘lib, boshqa konfiguratsiyalarga nisbatan nisbatan sustroq bog‘lanish kuzatildi. Biroq ushbu holatlarda ham ARG11, GLU13 va PHE16 qoldiqlarining ishtiroki qayd etildi. Ayniqsa, arginin qoldiqlari elektrostatik ta’sirlar orqali inulinning gidroksil guruhlari bilan kuchli bog‘lanish hosil qilgani aniqlandi. Ligandning (inulin qoldig‘i) kollagen yuzasidagi bo‘shliqlarga joylashuvi tahlil qilindi (3-rasm).



3-rasm. Kollagen yuzasida inulinning joylashuvi

3-rasmda keltirilgan sirt morfologiyasi tahliliga ko‘ra, kollagenning uch spiral-fibrillyar tuzilishi orasida mavjud mikrobo‘shliqlar inulin molekulalarining joylashishi uchun qulay muhit yaratgan. Inulinning ushbu bo‘shliqlarga kirib borishi kollagen matritsasining gidrofilligini oshiradi. Bu esa uning suvni yutish va namlikni saqlash xususiyatlarini yaxshilashga xizmat qiladi. Shuningdek, inulinning kollagen yuzasida bir tekis taqsimlanishi kompozitsiya strukturasida molekulalararo kuchlanishlarni kamaytirib, elastiklikning oshishiga olib keladi. Inulinning kollagen yuzasida fazoviy joylashuvi kompozitsiyaning bioparchalanish tezligini boshqarishda ham muhim omil bo‘lib xizmat qilishi mumkin. Kollagen:inulin kompleksidagi molekularlarning o‘zaro bog‘lanish mexanizmi 4-rasmda keltirilgan. Vizualizatsiya natijalarida inulin molekulasi kollagenning bir nechta aminokislota qoldiqlari bilan ko‘p nuqtali o‘zaro ta’sir hosil qilganligi aniqlandi. Kompleks hosil bo‘lishida ARG11, GLY12, GLU13, ARG14 va PHE16 qoldiqlari asosiy faol markaz sifatida ishtirok etgani kuzatildi. Ayniqsa, arginin qoldiqlarining guanidin guruhlari hamda inulinning gidroksil guruhlari orasida kuchli vodorod bog‘lari hosil bo‘lishi kompleksning barqarorligini oshirgan. GLU13 qoldig‘ining karboksil guruhi esa ligand bilan elektrostatik va dipol-dipol o‘zaro ta’sirlarda qatnashgani ehtimol qilinadi.

Shuningdek, GLY12 va GLY15 kabi glitsin qoldiqlarining mavjudligi kollagen spiral strukturasining moslashuvchanligini ta’minlab, ligandning oqsil ichki qismiga yaqinlashishiga yordam bergan. PHE16 aromatik qoldig‘i esa gidrofob stabilizatsiyada muhim rol o‘ynashi mumkin. 4-rasmda kuzatilgan ko‘p sonli vodorod bog‘lari kollagen va inulin o‘rtasida barqaror supramolekulyar tizim hosil bo‘lishini tasdiqlaydi.



4-rasm. Kollagen:inulin kompleksidagi bog‘lanish mexanizmi

Kollagenning tabbiy uch spiral fragmentlari orasida inulinning joylashishi kompozitsiyaning uch o‘lchamli strukturasini zichlashtirib, kompozitsiyaning strukturaviy yaxlitligini oshirishi mumkin.

Xulosa. Kollagen va inulin o‘rtasidagi molekulyar o‘zaro ta’sirlar docking usuli yordamidagi tahlil natijalari, tizimida bir nechta barqaror bog‘lanish markazlari mavjudligini ko‘rsatdi. Eng qulay hudud C4 konfiguratsiyasida kuzatilib, docking energiyasi -5,9 kkal/mol tashkil etdi. ARG11, GLY12, GLU13, ARG14, PHE16 va PRO17 aminokislota qoldiqlari asosiy faol markaz sifatida aniqlanib, ular inulinning gidroksil guruhlari bilan vodorod va elektrostatik bog‘lar hosil qilishi aniqlandi. 3D vizualizatsiya natijalari inulinning kollagen yuzasidagi gidrofil bo‘shliqlarga samarali joylashishini ko‘rsatdi. Bu esa kompozitsiyaning namlikni saqlash, biologik faollik va elastiklik xususiyatlarini oshirish imkonini beradi.

ADABIYOTLAR

1. Азимова Л.Б., Филатова А.В., Раджабов О.И., Отажонов А.Й. Джурабаев Д.Т., Тураев А. С. Получение и изучение физ-хим.свойств пленок на основе коллагена и меланина/Химия растит-го сырья.2025.№4.С.101-109.

2. Раджабов О.И., Мўйдинов Н.Т., Атажанов А.Ю., Тураев А.С. Коллаген ва полисахаридлар асосида композициялар олиш ва физ-ким-й хосс-рини аниқлаш/Анд.давлат университети хабарномаси,2021,№7,Б.24-31.

3. Муйдинов Н.Т., Раджабов О.И., Гулямов Т., Тураев А.С., Атажонов А.Ю., Баротов К.Р. Разработка состава и исследование физико-химических и противоспаечных свойств биополимерных пленок на основе коллагена и Na-КМЦ // Химия растительного сырья. 2023. №4. С. 81-88.

4. Rubel I.A., Iraporda C., Manrique G.D., Genovese D.B., Abraham A.G. Inulin from Jerusalem artichoke (*Helianthus tuberosus L.*). Current Opinion in Food Science. 2021. V. 26, 100281.

5. Muinova N., Radjabov O. Efficiency of ultrasound-assisted inulin separation // The Proceedings of the VIII International Scientific and Practical Internet-Conference. Kharkiv, 2026. -P. 92-93.

6. Morris G.M. Lindstrom W., Sanner M.F., Belew R.K., Goodsell D.S., Olson A.J. AutoDock4 and AutoDockTools4: Automated docking with selective receptor flexibility // Journal of Computational Chemistry. 2009. 30. P.2785-2791.

7. Trott O., Olson A.J. AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization, and multithreading // Journal of Computational Chemistry. 2010. 31. P. 455-461.

8. Ferreira A.M. Gentile P., Chiono V., Ciardelliet G. Collagen for bone tissue regeneration // Acta Biomaterialia. 2012. 8. P. 3191-3200.

9. Radjabov O.I., Yariev O.O., Azimova L.B., Djurabaev D.T., Filatova A.V., Turaev A.S. Na-KMS va I tip kollagenning o‘zaro ta’sirini molekulyar doking usulida ilmiy asoslash // Kompozitsion materiallar. 2026.1-son, B.30-33.

Джандуллаева М.С., Бекчанов Б.Б., Эркаев А.У., Кучаров Б.Х. Влияние режима термической обработки на физико-химические свойства серпентинита Султануиздагского месторождения …… 137

Бобокулова О.С., Зулярова Н.Ш., Самадий М.А., Тожиев Р.Р., Усманов И.И., Кенжаев М.Э. Кинетические характеристики процесса разложения доломита азотной кислотой …… 140

5. Методы исследовании, приборов и оборудований композиционных материалов

Утемуратов Б.М., Тўраев Т.Б., Алламбергенов А.Дж. Табиий газни қувур орқали ташишда иссиқлик алмашинув жараёнларини интенсивлаштириш ва қурилмани танлаш …… 144

Radjabov O.I., Muinova N.B., Azimova L.B., Filatova A.V., Turaev A.S. Kollagen va inulin kompozitsiyasini molekulyar modellashtirilishda strukturaviy xususiyatlar …… 147

Alimov A.F., Qurbanova L.M., Eshmamatova N.B., Akbarov X.I., Kuronboyev D.P., Norqobilova Sh.D., Ismoilova D.F. Po‘lat korroziyasida mahalliy xom ashyolar asosida olingan yashil ingibitorlarning fizik-kimyoviy xususiyatlari …… 150

Orzikulov B.T., Xaydarova S.R. Poliakrilonitril asosida tarkibida sulfo guruh tutgan ion almashinuvchi materiallar sintezi …… 154

Алимджанова Дж.И., Бабаханова З.А. Оптимизация процесса измельчения керамической массы в шаровых мельницах …… 157

Axmedova M.F., Ubaydullayeva D.H. Trikotaj matolarining ko‘p davrli cho‘zilish deformatsiyasini aniqlashda sinov ko‘rsatkichlarini optimallashtirish …… 160

Ergashev M.A., Qulmatov R.B. Markazdan qochma konsentratorda oltin va kumushni ajratib olishda yuvuvchi suv bosimi, pulpa qattiqligi va oziq sarfining ta’siri …… 162

Тажиева Г.Р., Сафаров А.Р. Спектроскопическое исследование комплексов Co(II) и Cu(II) с семикарбазидом …… 165

Djumayeva M.S., Amonov M.R. Modifikatsiyalangan va bo’yalgan matolarning mikroskopik tahlili …… 169

Abdullayeva G.A. Kobalt(II) ning 2-merkaptobenzotiazol bilan kompleks birikmasining sintezi va tadqiqoti …. 171

6. Проблемные обзоры

Холмуродова Д.К., Негматова К.С., Иброхимова Д.М. Анализ состояние технологии и применения хлопкового линта и основание требование к хлопковой целлюлозы на их основе для ацетилирования (Краткий обзор) …… 175

Каримов Ш.А., Шакиров Ш.М., Мирзарахимова З.Б. Отходы резиновых производств – перспективный материал для создания новых изделий …… 179

Кабулова Л.Б., Оразимбетова Г.Ж. Фазовые превращения в портландцементе при введении механоактивированного глинистого сланца …… 182

Razzoqov H.Q., Amonov M.R., Askarova G.A. Shofirkon bentoniti va sapropel asosidagi kompozitsion sorbentlarni shakllantirish hamda ularning koagulyant va polimer flokulyantlar ishtirokida sanoat oqova suvlarini tozalash samaradorligini tadqiq etish …… 185

Suyarova D.A., Erbo‘tayev D.Sh., Djurayev T.A., Usmonov F.D. Indol-3-sirka kislotasi va aminokislotalar asosida sintez qilingan yangi amid hosilalarining arpa (Hordeum Vulgare L.) o‘sishi va rivojlanishiga biologik ta’siri …… 188

Холмуродова Д.К., Негматова К.С. Изучение и анализ влияния органоминеральных ингредиентов и технологических фатеров на процесс ацетилирования. *Краткий обзор*…... …… 192

Файзиев М.М., Каршиев М. Газ ва суюқликларни чуқур тозалашга мўлжалланган анизотроп структурали фильтрлар олишнинг илғор технологиялари тахлили …… 195

Panjiyev A.X. Kalsiy siyanamidini olish jarayonining kinetik tahlili …… 199

Gulova M., Bo’rixonov B., Sapayev F. Monoxlorsirka kislotasining butil efirining uchlamchi aminlar bilan kvaternizatsiya reaksiyalarini o‘rganish …… 201

Kasimova A.B., Yoqubjonova O’.F. Antibakterial materiallar asosida erkaklar uchun zamonaviy sport kostyumini ishlab chiqish (tennis sporti misolida) …… 205