

DOI: <https://doi.org/10.5281/zenodo.12922517>

ALANIN AMINOKISLOTASINING DFT HISOBLASHLARI, PASS ANALIZI VA MOLEKULAR DOKINGI

**Ganiyev Baxtiyor Shukurulloevich,
Akramov Abror Yangiyevich,
Xoliqova Gulyayra Qo'ldosheva,
Jumayeva Zarina Rustam qizi**
Buxoro davlat universiteti

ANNOTATSIYA

*Maqolada alanin aminokislotasining kimyoviy xossalari va kvant-kimyoviy hisoblashlarini o'rganishga bag'ishlangan adabiyotlar tahlil etilib, natijalar o'rtasidagi bog'liqlik o'rganiladi. Gaussian dasturida alaninning geometriyasini to'liq optimallashtirish bilan elektron tuzilishini hisoblash DFT - funktsional zichlik nazariyasi usulida B3LYP/6-31**G va B3LYP/6-311++G(d,p) hamda M062X/6-311++G** valent bo'lingan asosli to'plamlar doirasida amalga oshirildi. Shuningdek, alanin molekulasining biologik faolligi – PASS analizi va molekulyar doking usullarida baholandi.*

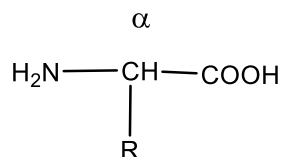
Kalit so'zlar: aminokislota, kvant-kimyoviy hisoblash, DFT, HOMO, LUMO, alanin, PASS analiz, molekulyar doking.

Kirish

Barcha oqsillarning asosiy qurilish elementlari aminokislotalar ekanligi ko'pdan buyon ma'lum bo'lsa ham, oqsillarning to'la aminokislotali tarkibi faqat XX asrning 30-yillaridagina batamom belgilandi. Buning sababi, bir tomondan aminokislotalar hali yaxshi o'rganilmagani, oqsil tarkibiga qaysi aminokislotalar kirganligi aniq ma'lum bo'lmaganligi bo'lsa, ikkinchidan ularning ayrim vakillarini sifat va miqdor analizi usullari hali mukammal bo'lmaganligi edi. Bu muammo faqat 40- yillarning boshlarida qog'oz xromotografiyasi usuli qo'llanilishi bilan hal bo'ldi [1-6].

α - aminokislotalar - geterofunktsional birikmalardir. Ular tarkibida karboksil - COOH va aminokislota -NH₂ guruhlari mavjud. Amino-guruh barcha proteinogen

aminokislotalarda α - uglerod atomida joylashganligidan, ular α - aminokislotalar qatorini tashkil qiladilar. Ularning umumiy formulasi quyidagicha:



Demak, barcha aminokislotalar bir-biridan faqat tarkibidagi R - radikali bilan farqlanadi. – CH(NH₂) – COOH qismi esa hamma aminokislotalarda bir xil.

Peptidlar, umuman oqsil molekulalarining aminokislota tarkibi yozilganda, ularning nomi boshlang'ich uch harfdan tuzilgan qisqartmalaridan foydalaniladi [4, 6]. Masalan, Alanin - Ala, Fenilalanin - Fen. Radikal (R) ning tabiati, unda qo'shimcha amino-, karboksil- va boshqa funktsional guruhlarning mavjud bo'lishiga qarab aminokislotalar turli guruhlarga bo'linadi.

Ushbu maqolada aminokislotalarning bir turi – alaninning kvant-kimyoviy hisoblash usulida olingan natijalar muhokamasi va biologik faolligini baholashning – PASS analiz hamda molekulyar doking usulida o'rganilgan tadqiqot natijalari bayoni keltirilgan.

Eksperimental qism

Alanin molekulasining kvant-kimyoviy hisoblashlar ishlari shaxsiy kompyuterda Frisch va boshqa hammualliflikda yaratilgan Gaussian 09W dasturiy ta'minoti amalga oshirildi [7-11]. Beckning uch parametrlilik funksional gibridini LYP funksional korrelyatsiyasi bilan birgalikda ishlatish (B3LYP) eng mustahkam gibrid oilalardan biri hisoblanadi [7, 10, 11]. Gaussiandagi hisoblangan out fayllari Gauss View dasturi yordamida vizualizatsiyalashtiriladi [7]. Elektron xossalarni, YuBMO-QBMO/(HOMO-LUMO) energiyalarni, zaryadlarning atomlar bo'yicha Malliken taqsimotini hisoblashlar funksional zichlik nazariyasi (DFT) (B3LYP) usuli yordamida 6-311G++ (d, p) asosli to'plam bilan amalga oshirildi.

Ushbu maqolada alaninning biologik faolligi PASS – komputer dasturi yordamida bashorat qilindi. Bu dastur PASS (Prediction Activity Structure Substances – Moddalarning tuzilishiga asosan faolligini bashorat qilish) Rossiyalik olimlar V.V. Poroikov hamda D.A. Filimonovlar tomonidan yaratilgan [12]. PASS online dasturi (<https://www.way2drug.com/PASSOnline/index.php>) biologik faolligi ma'lum bo'lgan 30 000 dan ortiq biologik faol moddalarni o'z ichiga olgan majmuani o'z ichiga oladi va 400 dan ortiq farmakologik ta'sirlarni, ta'sir qilish mexanizmlarini, shuningdek mutagenlik, kanserogenlik, teratogenlik va embriotoksiklikni qamrab oladi [13]. PASS ochiq tizim bo'lib, foydalanuvchi mavjud o'quv majmuasiga qo'shimcha moddalar qo'shishi yoki uni qayta yaratishi va tizimni qayta tayyorlashi mumkin.

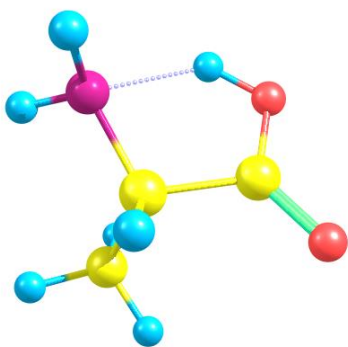
Alanin aminokislotasining zamburug`ga nisbatan faolligi *Vertisilium dalhliae* zamburug`idan olingan oqsil (PDB ID: 5xmz) ga CB-Dock2 onlayn serveri yordamida o`zaro ta'sirini o`rganildi va natijalar maqolaning muhokama bo`limida bayon etildi [14, 15].

Olingan natijalar va ularning muhokamasi

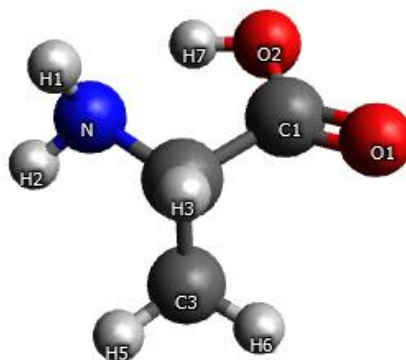
Alanin — aminopropion kislotasi. Har turli oqsillarning tarkibiga kiradi. Qon plazmasida bo'sh uchraydi; oqsil tarkibiga kiradigan 20-ta aminokislotalarning biri: $\text{CH}_3\text{-CH}(\text{NH}_2)\text{-COOH}$ tabiatda aminokislotaning 2 izomeri turida keng tarqagan [4, 6]. Aminokislotalardan glitsin va leysinga xos kvant-kimyoviy hisoblashlar mualliflar tomonidan amalga oshirilgan tadqiqot natijalari sifatida nashr etilgan bo`lib, ushbu maqolada alanin molekulasining kvant-kimyoviy hisoblashlari muhokama etilgan [16, 17, 18].

DFT hisoblashlari

Alanin molekulasining infraqizil, Raman va elektron spektrlari qattiq va suvli eritmada o`rganilgan. Neytral va uning svitter-ion shaklidagi alaninning asosiy holatlari va quyi bo'sh elektron holatlarining energiyalari uchun tebranish chastotalari DFT usullari yordamida turli xil asos to'plamlari bilan hisoblab chiqilgan. Gaussian dasturi B3LYP/6-31**G va MO62X/3-311+G** usullari bilan gaz fazasida L -alaninning tebranish chastotalari bo'yicha hisoblashlar amalga oshirildi (1-2-rasmlar).



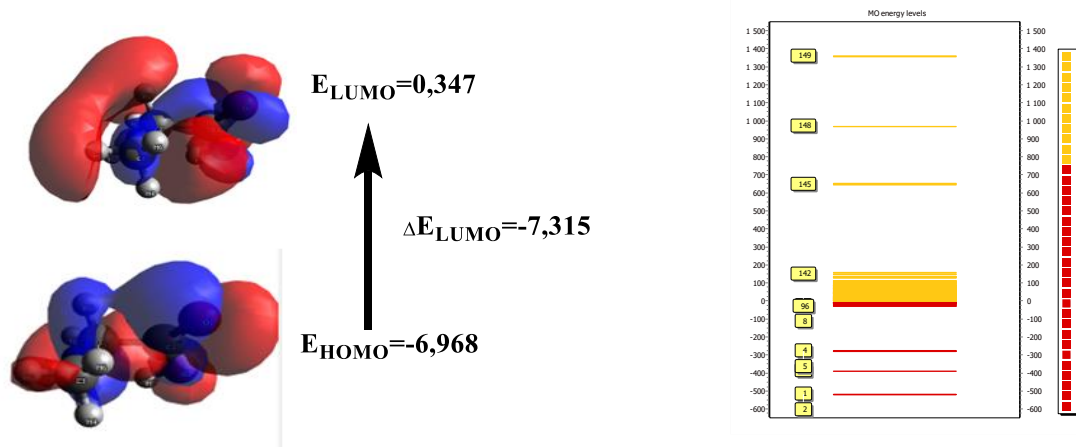
1-rasm. B3LYP/6-31++G usulida optimizatsiyalangan alanin molekulasining tuzilishi



2-rasm. MO62X/3-311+G** usulida optimizatsiyalangan alanin molekulasining tuzilishi

1-jadvalda turli hisoblash usullari (PM6, PM3, AM1, RM1 va MNDO) yordamida gaz va suvli fazalardagi o`rganilayotgan alanin uchun hisoblangan ba'zi energetik parametrlarining qiymatlari ko'rsatilgan. Chegara molekulyar orbitallarning energiyalari (yuqori band molekulyar orbitalning energiyasi E_{HOMO} va quyi bo'sh molekulyar orbitalning energiyasi E_{LUMO}) kimyoviy moddaning reaktivligini aniqlash uchun muhim parametrlardir. Korroziyani ingibirlash samaradorligi va bir nechta kvant kimyoviy parametrlari, jumladan E_{HOMO} va E_{LUMO} o'rtasida yaxshi bog'liqlik

asosida topiladi. E_{HOMO} bo'sh molekulyar orbital bilan mos keladigan qabul qiluvchiga elektronlarni berish uchun inhibitor molekulasining joylashishi bilan bog'liq. Shunday qilib, E_{HOMO} qiymatini oshirish adsorbsiyani rag'batlantirishi va shuning uchun inhibitsyon samaradorligini oshirishi mumkin.



3-rasm. Alaninning molekulasini YuBMO va QBMO energetik diagrammasi

Boshqa tomondan, E_{LUMO} alanin molekulasining elektronlarni qabul qilish qobiliyatini ko'rsatadi, bu o'rganilayotgan aminokislotalarning ingibirlash samaradorligi E_{LUMO} qiymatlarining pasayishi bilan oshishi kutilayotganligini anglatadi (3-rasm). E_{HOMO} va E_{LUMO} uchun olingan natijalarga asoslanib, o'rganilayotgan aminokislotalarning ingibirlash samaradorligi eksperimental natijalardan olingan tendentsiyaga mos kelishini aytish mumkin.

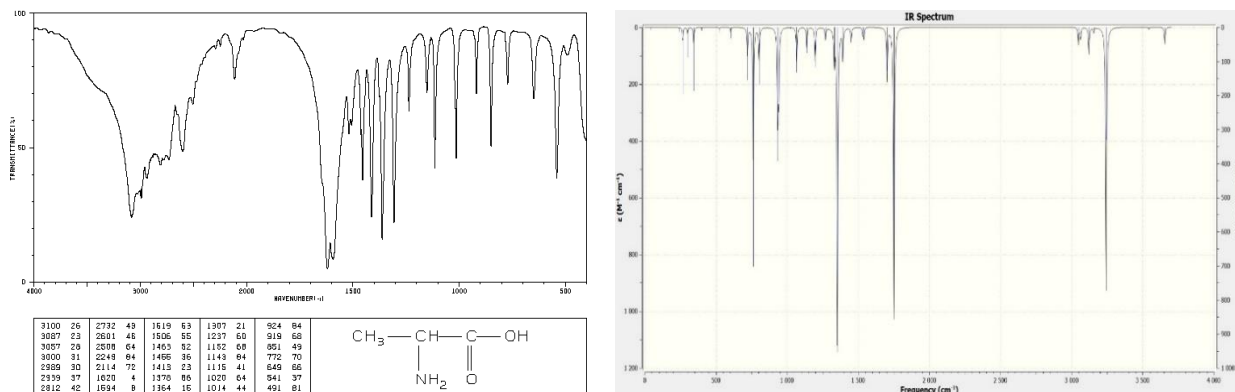
Shuningdek, 1-jadvalda alanin molekulasining turli yarim empirik usullar bilan hisoblangan dipol moment qiymatlari ham keltirilgan. Aminokislota dipol momentining pasayishiga asoslanib, ingibirlash samaradorligining kutilayotgan tendentsiyasi ham chegara molekulyar orbitallarning energiyasiga asoslangan tendentsiyaga mos keladi [19].

1-jadval

Gaz fazada va suv muhitida hisoblangan alanin molekulasining energetik parametrlari

Hisoblash usullari	Gaz fazada				Suv muhitida			
	L (Debye)	E_{HOMO} (eV)	E_{LUMO} O (eV)	E_{L-H} (eV)	L (Debye)	E_{HOMO} O (eV)	E_{LUMO} O (eV)	E_{L-H} (eV)
PM6	2.02	-8.97	0.49	9.46	2.80	-9.10	0.22	9.32
PM3	1.61	-8.68	1.07	9.75	2.20	-8.71	0.94	9.65
AMI	1.52	-9.31	1.27	10.58	2.06	-9.34	1.11	10.45
RM1	1.51	-9.27	1.21	10.48	2.04	-9.32	1.05	10.37
MNDO	1.37	-9.68	1.06	10.74	1.89	-9.70	0.97	10.67
B3LYP/6-31++G	5.38	-6.968	0.347	7.315	5.42	-6.972	0.334	7.306

Alanin molekulasining infraqizil spektrlari Spectral Database for Organic Compounds, SDBS. spektral ma'lumotlar bazasidagi spektrlari tebranish chastotalari DFT usullari yordamida Gaussian dasturi B3LYP/6-31**G usuli bilan gaz fazasida hisoblangan L -alaninning IQ spektroskopik valent va deformatsion tebranish chastotalari taqqoslab o'rganildi (4-rasm).



4-rasm. Alaninning eksperimental va hisoblangan IQ spektrlari

PASS analizi

PASS dasturi stereoizomerlarning biologik faollikning namoyon bo'lishiga ta'sirini baholashga imkon bermaydi, chunki hozirgi vaqtda ko'plab moddalarning fazoviy tuzilishining xususiyatlarini hisobga oladigan dasturiy ta'minot mavjud emas. Tabiiyki, PASS dasturi tomonidan bashorat qilingan biologik faolliklarini tahlil qilishda eksperimental sinovlarning real imkoniyatlarini hisobga olish kerak. Bunday holda, biologik faollikni eng ko'p ehtimoldan eng kam ehtimolgacha ketma-ket o'rganish tavsiya qilinadi.

Shuni ta'kidlash kerakki, PASS dasturi ma'lum bir moddaning dori vositasiga aylanishini oldindan aytib bera olmaydi, chunki bu bir qator turli omillarga bog'liq. Biroq, bashorat, tahlil qiluvchining qaysi biologik faolliklari uchun birinchi navbatda sinovdan o'tkazilishi kerakligini va qaysi moddalar kerakli faollikni namoyon etishi mumkinligini aniqlashga yordam beradi. PASSda qo'llaniladigan matematik algoritm maqsadli tahlil qilish va shunga o'xshash muammolarni hal qilish uchun ko'p sonli turli usullarning samaradorligini taqqoslash orqali tanlangan. PASS tizimini amaliy qo'llash uchun 85% bashorat qilishning aniqligi etarli, chunki 780 turdagi faoliyatdan birini tasodifiy taxmin qilishning kutilayotgan ehtimoli taxminan 0,1% ni tashkil qiladi [12, 13, 20].

PASS dasturi yordamida alifatik monoamino- monokarbon kislota –alaninning biologik faolliklari o'rganildi (2-jadval).

Alaninning PASS online dasturi bo`yicha birikmalarning yuqori biologik faollik turlari va ko`rsatkichlari

P_a - Faollik	P_i - Nofaollik	Biologik faollik turi
0,963	0,002	Acylcarnitine hydrolase inhibitor
0,955	0,002	NADPH peroxidase inhibitor
0,949	0,001	Dimethylargininase inhibitor
0,945	0,001	NADPH-cytochrome-c2 reductase inhibitor
0,943	0,002	Arginine 2-monooxygenase inhibitor
0,942	0,001	Aspartate-ammonia ligase inhibitor
0,943	0,002	Arylacetonitrilase inhibitor
0,938	0,004	Membrane integrity agonist
0,935	0,003	Superoxide dismutase inhibitor
0,932	0,002	Glutamine-phenylpyruvate transaminase inhibitor
0,929	0,001	S-alkylcysteine lyase inhibitor
0,925	0,002	Mucinaminylserine mucinamidase inhibitor
0,926	0,004	Sphinganine kinase inhibitor
0,924	0,002	Lysine 2,3-aminomutase inhibitor
0,922	0,001	Glycine dehydrogenase (decarboxylating) inhibitor
0,924	0,004	Chymosin inhibitor
0,924	0,004	Saccharopepsin inhibitor
0,924	0,004	Acrocyllindropepsin inhibitor
0,925	0,004	Methylenetetrahydrofolate reductase (NADPH) inhibitor
0,923	0,003	Antiseborrheic
0,921	0,002	Fragilysin inhibitor
0,920	0,002	Pseudolysin inhibitor
0,920	0,002	Omptin inhibitor
0,918	0,004	Phobic disorders treatment
0,915	0,002	Threonine aldolase inhibitor
0,917	0,004	Pro-opiomelanocortin converting enzyme inhibitor
0,916	0,003	Monodehydroascorbate reductase (NADH) inhibitor
0,915	0,002	Fusarinine-C ornithinesterase inhibitor
0,916	0,004	Beta-adrenergic receptor kinase inhibitor
0,916	0,004	G-protein-coupled receptor kinase inhibitor
0,913	0,003	Protein-disulfide reductase (glutathione) inhibitor
0,910	0,002	Levanase inhibitor
0,908	0,001	D-alanine 2-hydroxymethyltransferase inhibitor
0,907	0,002	Leucolysin inhibitor
0,909	0,005	Polyporopepsin inhibitor
0,906	0,002	Methylamine-glutamate N-methyltransferase inhibitor
0,906	0,003	Fucosterol-epoxide lyase inhibitor
0,908	0,006	Mucositis treatment
0,901	0,002	Hydrogen dehydrogenase inhibitor
0,901	0,004	Peptidyl-dipeptidase Dcp inhibitor

Alaninning 5XMZ oqsiliga molekulyar dokingi

Molekulyar doking usuli kimyo va biologiyada reseptor-substratning o‘zaro ta’siriga asoslangan yangi biologik faol birikmalarni aniqlash uchun keng qo‘llaniladi. Bundan tashqari, usul bizga ligand yoki kompleksning makromolekula bilan o‘zaro ta’sir mexanizmini o‘rganishga va oqsilning faol markazida ligandning qulay konformasiyasini topishga imkon beradi. Shuni inobatga olgan holda biz aminokislotalarning *Vertisilium dalhiae* (PDB ID: 5xmz) zamburug‘idan olingan oqsilga CB-Dock2 onlayn serveri yordamida o‘zaro ta’sirini o‘rgandik va natijalar ushbu bo‘limda bayon etildi [14, 15, 21-25].

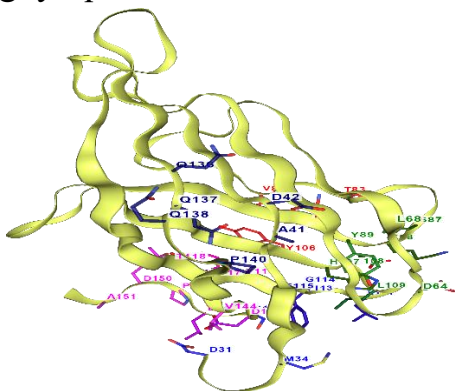
CB-Dock2 onlayn serveri yordamida dastlab 5XMZ oqsilining ligand – alanin bilan ta’sirlashish bo‘shliqlari izlandi, bunda 103, 92, 88, 55 va 48 Å³ hajmdagi 5 ta faol bo‘shliq markazi aniqlandi (5-rasm, 3-jadval). So‘ng ligand va oqsil serverga yuklanib, molekulyar doking amalga oshirildi.

3-jadval

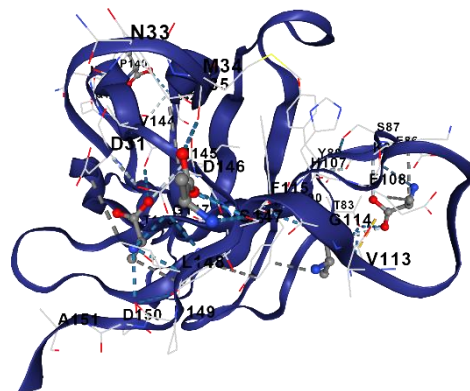
Alaninning 5XMZ oqsiliga molekulyar doking natijalari

Bo‘shliq raqami	Bo‘shliq hajmi (Å ³)	Markaz (x, y, z)	Bo‘shliq o‘lchami (x, y, z)	Bo‘shliq raqami	Vina score	Bo‘shliq hajmi (Å ³)	Markaz (x, y, z)	Doking hajmi (x, y, z)
C1	103	-11, 31, 2	12, 9, 6	C3	-4.0	88	-24, 27, -4	15, 15, 15
C2	92	-21, 37, 0	8, 5, 5	C1	-3.3	103	-11, 31, 2	15, 15, 15
C3	88	-24, 27, -4	6, 7, 7	C5	-2.9	48	-10, 22, -22	15, 15, 15
C4	55	-7, 36, -4	7, 5, 8	C4	-2.8	55	-7, 36, -4	15, 15, 15
C5	48	-10, 22, -22	5, 5, 3	C2	-2.7	92	-21, 37, 0	15, 15, 15

Oqsil va ligandning o‘zaro ta’siridan yuqoridagi keltirilgan bo‘shliqlarga mos ravishda -4,0; -3,3; -2,9; -2,8 va -2,7 kcal/mol energiyaga ega faollik kuzatildi (6-rasm). Natijalar shuni ko‘rsatadiki hajmi eng katta va eng kichik bo‘shliqda ligandning faolligi yuqori bo‘ladi.



5-rasm. Bo‘shliqlarni qidirish natijalari



6-rasm. 5XMZ oqsilining izlangan bo‘shliqlariga ligandning o‘zaro ta’siri

Xulosalar

Xulosa o`rnida olingan tadqiqot natijalari asosida quyidagilarni ta`kidlash mumkin:

- kvant-kimyoviy hisoblashlar asosida korroziya ingibitorlik xossasi aniqlandi.
- biologik faolliklari PASS analizi va molekulyar doking asosida baholanib, 40 dan ortiq biologik faollik hamda 5XMZ oqsiliga nisbatan -4,0 kcal/mol ta`sir energiyasi aniqlandi.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. Северин Е.С. Биохимия: Учебник для вузов под. редакции Северина Е.С. – Москва: ГЭОТАР Медиа. – 2004. – 784 с.
2. Сырoвая А.О., Шаповал Л.Г., Макаров В.А. и др. Аминокислоты глазами химиков, фармацевтов, биологов в двух томах. - Харьков. – Щедра садиба плюс.- 2014. – Том №1. – 228 с.
3. Qodirova Z.K. Bioorganik kimyodan laboratoriya mashg`ulotlari. Elektron hisoblash mashinalari uchun yaratilgan dasturning rasmiy ro`yxatdan o`tkazilganligi to`g`risidagi guvoxnoma. № DGU 35294. Talabnoma DGU 202402965. Dasturiy mahsulotlar davlat reestrda 25.03.2024 y. ro`yxatdan o`tkazilgan.
4. Qodirova Z.K. Bioorganik kimyodan laboratoriya mashg`ulotlari. O`quv qo`llanma. Buxoro, Durdon. 2022. -144 b.
5. Племенков В.В. Введение в химию природных соединений. Казань. 2001. 376 с.
6. Тюкавкина Н.А., Бауков Ю.И.. Биоорганическая химия. 3-е издание. Москва. 2004. 528 с.
7. Бутырская Е.В., Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и Gaus View. Москва, Салон-Пресс, 2011, 224 с.
8. Cramer J.C. Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models. John Wiley, 2004, p.596.
9. В.Т. Ibragimov, М.У. Ergashov, А.Г. Yeshimbetov, Е.В. Eshtemirov, А.Т. Jo`rayev. Kimyoda kompyuter modellashtirish. [Matn]: darslik / - Buxoro: "BUXORO DETERMINANTI" MCHJning Kamolot nashriyoti, 2022. -284 b.
10. Rappoport D., Furche F. Property-optimized Gaussian basis sets for molecular response calculations //The Journal of chemical physics. – 2010. – Т. 133. – №. 13. – С. 134105.

11. Scuseria G. E. Linear scaling density functional calculations with Gaussian orbitals //The Journal of Physical Chemistry A. – 1999. – Т. 103. – №. 25. – С. 4782-4790.
12. Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ PASS № 2006613275 от 15 сентября 2006 г., Москва, Федеральная служба по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам.
13. Филимонов Д.А., Поройков В.В. Прогноз спектров биологической активности органических соединений // Российский химический журн. — 2006. — № 2(50). — С. 66–75.
14. Liu, Y., Grimm, M., Dai, W. T., Hou, M. C., Xiao, Z. X., & Cao, Y. (2020). CB-Dock: a web server for cavity detection-guided protein–ligand blind docking. *Acta Pharmacologica Sinica*, 41(1), 138-144.
15. Liu Y. et al. CB-Dock2: Improved protein–ligand blind docking by integrating cavity detection, docking and homologous template fitting //Nucleic acids research. – 2022. – Т. 50. – №. W1. – С. W159-W164.
16. Jumaqulov Sh.T., Ganiyev B.Sh., Xoliqova G.Q., Jumayeva Z.R., Samiyev S.N. L-Leysin Aminokislotasining Kimyoviy Xossalari Va Kvant-Kimyoviy Hisoblashlari //Journal of Innovation in Education and Social Research. – 2024. – Т. 2. – №. 1. – С. 92-96.
17. Jumaqulov Sh.T., Ganiyev B.Sh., Xoliqova G.Q., Jumayeva Z.R., Samiyev S.N. Glitsin aminokislotasining kvant-kimyoviy hisoblashlari. “Fizikaviy va kolloid kimyo fanlarining fundamental va amaliy muammolari hamda ularning innovatsion yechimlari” mavzusidagi xalqaro ilmiy-amaliy anjumani. 9-10 fevral. Namangan. 2024. B. 1113-1116
18. Jumaqulov Sh.T., Ganiyev B.Sh., Samiyev S.N., Jumayeva Z.R., Xoliqova G.Q. Glitsin aminokislotasining kvant-kimyoviy hisoblashlari. Tibbiyot sohasida tibbiy kimyo, biokimyo va biofizikada istiqbolli tadqiqotlar. Xalqaro ilmiy-amaliy anjuman tezislari to'plami. Buxoro. 17-18may. B. 175-178
19. Arslan T, Kandemirli F, Ebenso EE, Love I, Alemu H. Quantum chemical studies on the corrosion inhibition of some sulphonamides on mild steel in acidic medium. *Corrosion Sci* 2009;51(1):35–47.
20. 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. – Т. 50. – С. 444-457.
21. Ganiyev B.Sh., Jumaqulov Sh.T., Jumayeva Z.R., Xoliqova G.Q., Samiyev S.N. Glitsin va alanin aminokislotalarining 5XMZ oqsiliga molekulyar dokingi. “Kimyoning dolzarb muammolari” mavzusidagi Respublika ilmiy-amaliy konferensiya materiallari to'plami. 21-22-iyun. Urganch. 2024. B. 340-342

22. Авезов Қ.Ғ., Умаров Б.Б., Ганиев Б.Ш., Эргашова Б.З., Холиқова Г.Қ. 2-трифторацетилциклогексанон бензоилгидразонининг 5ХМZ оксилага таъсирини молекуляр докинг усулида ўрганиш. “Супрамолекуляр кимёнинг ютуқ ва истиқболлари” мавзuidaги Республика илмий-амалий анжумани. 15 май. Тошкент. Б. 62-63

23. Rahmatova R.S., Abduraxmonov S.F., Xudoyarova E.A., Ganiyev B.Sh., Mardonova G.E. Asetilasetoanilidning xossalari va molekulyar dokingi. “Supramolekulyar kimyoning yutuq va istiqbollari” mavzuidagi Respublika ilmiy-amaliy anjumani. 15 may. Toshkent. B. 216-218

24. Homitova G.Z., Avezov H.T., Ganiyev B.Sh. Qalampir yalpiz o‘simligidan ajratib olingan efir moyi tarkibidagi mentolning molekulyar dokingi. “Supramolekulyar kimyoning yutuq va istiqbollari” mavzuidagi Respublika ilmiy-amaliy anjumani. 15 may. Toshkent. B. 187-189

25. Авезов Қ.Ғ., Умаров Б.Б., Холиқова Г.Қ. PASS ONLINE, CB-DOCK2, ARGUSLAB дастурларида 2-трифторацетил-циклогексанон бензоилгидразонининг анализи ва молекуляр докинги. “Товарлар кимёси ҳамда Халқ таъбири муаммолари ва истиқболлари” мавзuidaги X Халқаро миқёсidaги илмий-амалий анжуман. Андижон. 2023 й. 15-16 сентябр. Б. 63-65