



МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
КАФЕДРА БІОЛОГІЧНОЇ ХІМІЇ ТА
ВЕТЕРИНАРНОЇ МЕДИЦИНИ

MINISTRY OF HEALTH OF UKRAINE
NATIONAL UNIVERSITY OF PHARMACY
DEPARTMENT OF BIOLOGICAL CHEMISTRY
AND VETERINARY MEDICINE



**ЗБІРНИК
публікацій
I Міжнародної науково-практичної
online конференції
«СУЧАСНІ ДОСЯГНЕННЯ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЇ,
КЛІНІЧНОЇ, ЕКОЛОГІЧНОЇ БІОХІМІЇ ТА
МОЛЕКУЛЯРНОЇ БІОЛОГІЇ»,
присвячена 85-річчю з дня заснування кафедри біохімії**

**BOOK
of publications
of I International scientific and practical
online conference
"MODERN ACHIEVEMENTS OF EXPERIMENTAL,
CLINICAL, ENVIRONMENTAL BIOCHEMISTRY AND
MOLECULAR BIOLOGY",
dedicated to the 85th Anniversary of the Department of Biochemistry**

**07 березня 2024 р.
м. Харків, Україна
March 07, 2024
Kharkiv, Ukraine**



УДК 615.1
ББК 52.8
А 43

ЕЛЕКТРОННЕ ВИДАННЯ

Редакційна колегія: проф. Алла КОТВИЦЬКА, проф. Інна ВЛАДИМИРОВА, проф. Віра КРАВЧЕНКО, проф. Нодар СУЛАШВІЛІ, проф. Юлія РАЗУМІЄНЕ, доц. Ігор СЕНЮК, доц. Олена ЩЕРБАК.

Укладачі: проф. Віра КРАВЧЕНКО, доц. Ігор СЕНЮК, доц. Олена ЩЕРБАК.

Сучасні досягнення експериментальної, клінічної, екологічної біохімії та молекулярної біології: збірник публікацій I Міжнародної науково-практичної *online* конференції, присвяченої 85-річчю з дня заснування кафедри біохімії (м. Харків, 07 березня 2024 р.). – Х. : НФаУ, 2024. – 593 с.

Конференція внесена до реєстру з'їздів, конгресів, симпозіумів та науково-практичних конференцій, які заплановані у 2023 році, реєстраційне посвідчення УкрІНТЕІ № 590, від 11.12.2023 р.

Дане видання представлено збірником матеріалів науково-практичної конференції, в якому наведені сучасні та актуальні питання розвитку експериментальної та клінічної біохімії. Метою заходу стало презентування результатів експериментальних досліджень науковців, які спрямовані до поглибленого вивчення клітинних та молекулярних механізмів розвитку поширених патологічних станів та їх фармакокорекцію. Автори у своїх роботах приділили увагу щодо вивчення біохімічних механізмів дії біологічно активних сполук та лікарських засобів, тим самим висвітлюючи актуальні питання медичної та фармацевтичної біохімії. Науковий захід популяризує сучасні експериментальні дослідження, які розкривають біохімічні процеси у функціонуванні організму людини та у розкритті патогенетичних аспектів діагностики, лікування і профілактики захворювань.

Видання розраховане для широкого кола науковців та практичних фахівців у галузі знань «Охорона здоров'я», а також для усіх охочих, які зацікавлені у розвитку експериментальних наукових проєктів.

УДК 615
ББК 52.8

© Національний фармацевтичний університет, 2024р.



UDC 615.1
BBK 52.8
A 43

ELECTRONIC PUBLISHING

Editorial board: prof. Alla KOTVITSKA, prof. Inna VLADIMIROVA, prof. Vira KRAVCHENKO, prof. Nodar SULASHVILI, prof. Julija RAZUMIENE, ass. prof. Igor SENIUK, ass. prof. Olena SHCHERBAK.

Redactors: prof. Vira KRAVCHENKO, ass. prof. Igor SENIUK, ass. prof. Olena SHCHERBAK.

Modern achievements of experimental, clinical, environmental biochemistry and molecular biology: book of publications of I International scientific and practical *online* conference, dedicated to the 85th Anniversary of the Department of Biochemistry (Kharkiv, March 07 2024). – Kh. : NUPh, 2024. – 593 p.

The conference is included in the register of congresses, symposia and scientific-practical conferences planned for 2023, registration certificate UkrINTEI No 590, dated 11.12.2023.

This publication represents the collection of scientific and practical conference materials relating the modern and topical issues of experimental and clinical biochemistry.

The purpose of the event is to present the results of scientists' experimental studies, which are aimed at in-depth study of cellular and molecular mechanisms of common pathological conditions development, and their pharmacocorrection. In the scientific works, the authors paid attention to investigation of biologically active compounds biochemical mechanisms and medications action, thereby covering current issues of medical and pharmaceutical biochemistry. The scientific event promotes modern experimental research that helps to understand the biochemical processes in the human body, as well as to assist in the diagnostics, treatment and prophylaxis of diseases.

The publication is designed for a wide range of scientists and practitioners in the field of knowledge "Public Health", as well as for all those who are interested in the development of experimental research projects.

UDC 615
BBK 52.8

© National University of Pharmacy, 2024



PREDICTION OF THE POTENTIAL ANTI-INFLAMMATORY EFFECT OF DERIVATIVES OF (3-BENZYL-4-OXO-3,4-DIHYDROQUINAZOLIN-2-YL)THIOACETIC ACID BY MOLECULAR DOCKING STUDY

Battach Y., Vlasov S.V.

National University of Pharmacy, Kharkiv, Ukraine

2024pharmchem.vlasov@gmail.com

Introduction. 3-Benzylquinazolines with a hydrazone moiety in position 2 are known for their anti-inflammatory activity, while 3-benzyl-2-alkylthioquinazolines are better known as anticancer agents with a tyrosine kinase mechanism of action. Taking into account the prospects of the quinazoline scaffold for modern medical chemistry, we conducted a study of a number of 3-benzyl-2-(alkylthio)quinazolines for the possibility of being COX-2 inhibitors, and therefore acting as anti-inflammatory agents with a reduced number of side effects characteristic of non-selective COX inhibitors.

The aim of the study. Docking analysis of derivatives of (3-benzyl-4-oxo-3,4-dihydroquinazolin-2-yl)thioacetic acid in order to establish the structures of molecules that can have anti-inflammatory activity and realize their effect by binding to the active site of COX-2.

Materials and Methods. The structures of the compounds were drawn using ACD/ChemSketch (freeware) and saved in .pdb format using Discovery Studio Visualizer 2021. AutoDockTools-1.5.7 was used to convert .pdb files to .pdbqt, the number of active rotatory bonds was set by default. AutoDock Vina was used to calculate molecular docking. Discovery Studio 2021 was used for visualization.

Results and Discussion. According to the results of docking studies of the series of amides in the active site of COX-2, it was established that amides (3-benzyl-4-oxo-3,4-dihydroquinazolin-2-yl)thioacetic acid do not bind to it, instead methyl [(3-benzyl-4-oxo-3,4-dihydroquinazolin-2-yl)sulfanyl]acetate proved to be an effective ligand. This indicates the potential of the methyl ester itself as a potential COX-2 inhibitor that may have anti-inflammatory activity.

Conclusions. Based on the molecular docking results, it was possible to identify methyl [(3-benzyl-4-oxo-3,4-dihydroquinazolin-2-yl)sulfanyl]acetate as a potential COX-2 inhibitor that can be used in the therapy of inflammatory diseases and is probably devoid of side effects typical for compounds capable of binding to the active site of COX-1 only.

