



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 представлене 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



STUDY OF THE POTENTIAL ANTI-TUBERCULOSIS ACTIVITY OF DERIVATIVES OF [3-(2-METHOXYETHYL)-4-OXO-3,4- DIHYDROQUINAZOLIN-2-YL]THIOACETIC ACID BY MOLECULAR DOCKING

Idoumghar W., Vlasov S.V.

National University of Pharmacy, Kharkiv, Ukraine

2024pharmchem.vlasov@gmail.com

Introduction. Tuberculosis is a problem of humanity, and currently there is an epidemic of this disease, which is associated with the low sensitivity of *M. tuberculosis* to most antibiotics. Despite the fact that therapy requires about six months even if it is successful, tuberculosis is a curable disease. The problem of therapy is significantly complicated for resistant strains of tuberculosis. Therefore, much attention is paid to the development of new potentially effective antimicrobial agents to reduce the resistance of tuberculosis strains.

The aim of the study. The aim of our work was to analyze the potential of antituberculosis activity of quinazolones modified in position 3 with an attractive ADME parameter methoxyethyl fragment through the mechanism of inhibition of TrmD, which is an important enzyme for protein synthesis by the bacterial cell and an innovative target for the development of antibiotics.

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. As a result of docking studies in the active site of TrmD isolated from *M. tuberculosis* for [3-(2-methoxyethyl)-4-oxo-3,4-dihydroquinazolin-2-yl]thioacetic acid derivatives, it was found that the best binding parameters are characteristic for 3-chloromethylphenyl amide and ethyl ester of this acid. However, the position of the 3-chlorophenyl derivative is closer to that of the native inhibitor.

Conclusions. According to docking simulation to TrmD isolated from *M. tuberculosis*, it was established that 2-([3-(3-chlorophenyl)-2-oxopropyl]thio)-3-(2-methoxyethyl)quinazolin-4(3H)-one an anti-tuberculosis agent with an innovative mechanism of action