



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



**STUDY OF MOLECULAR MECHANISMS OF
ANTI-TUBERCULOSIS ACTIVITY OF
5,6-DIMETHYL-2-(ALKYLTHIO)-3-PHENYLTHIENO[2,3-d]PYRIMIDINE-
4(3H)-ONE DERIVATIVES**

El-Mouddene H., Vlasov S.V.

National University of Pharmacy, Kharkiv, Ukraine

2024pharmchem.vlasov@gmail.com

Introduction. Among the population of our planet, a significant number of people are carriers of the causative agent of tuberculosis. The causative agent of this disease, *M. tuberculosis*, can cause disease in any part of the body (extrapulmonary tuberculosis), but the main and most problematic form of the disease is pulmonary tuberculosis, which is the most common of all. The treatment regimen for tuberculosis includes a combination of four drugs: isoniazid, rifampicin, pyrazinamide, and ethambutol, administered for at least 6 months. But in cases of persistent tuberculosis, this scheme may not be effective. Therefore, innovative approaches to the creation of anti-tuberculosis drugs are relevant.

The aim of the study. Search among a number of synthetically available 5,6-dimethyl-2-(alkylthio)-3-phenylthieno[2,3-d]pyrimidin-4(3H)-one derivatives for potential mycobacterial TrmD inhibitors that may be effective against resistant strains tuberculosis alone or in combination with other anti-tuberculosis agents.

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 a number of synthetically available derivatives of 5,6-dimethyl-2-(alkylthio)-3-phenylthieno[2,3-d]pyrimidin-4(3H)-one, it was established that the best binding parameters with the active site of inhibitors mycobacterial TrmD had an S-benzyl deriv.

Conclusions. It was found that 2-(benzylthio)-5,6-dimethyl-3-phenylthieno[2,3-d]pyrimidin-4(3H)-one is a potential inhibitor of mycobacterial TrmD and is a potential innovative drug for overcoming tuberculosis resistant to standard pharmacotherapy .