



DOI: <https://doi.org/10.11603/2312-0967.2026.3.16483>

УДК 615.281.5

МАШИННЕ НАВЧАННЯ У ПОШУКУ НОВИХ ПРОТИТУБЕРКУЛЬОЗНИХ АГЕНТІВ: ВІД СКРИНІНГУ БАЗИ ChEMBL ДО КЛАСИФІКАЦІЇ ПРИРОДНИХ СПОЛУК

Г. Я. Загричук, Д. О. Польовий, Л. А. Бойко, Л. М. Іванець, Н. І. Гарліцька

Тернопільський національний медичний університет імені І. Я. Горбачевського
Міністерства охорони здоров'я України
zagrichuk@tdmu.edu.ua

ІНФОРМАЦІЯ

Дата першого надходження
рукопису до видання / Received:
03.06.2026

Дата прийняття статті до друку
після рецензування / Accepted:
28.09.2026

Дата публікації статті / Published:
16.10.2026



Стаття поширюється на умовах
ліцензії відкритого доступу
(CC BY 4.0)

Ключові слова:

машинне навчання,
in silico дослідження,
активний фармацевтичний інгре-
дієнт,
XGBoost,
ChEMBL,
мінімальна інгібуюча концентрація,
Mycobacterium tuberculosis,
RDKit,
Python.

АНОТАЦІЯ

Вступ. У роботі запропоновано послідовність взаємопов'язаних кроків оброб-
ки даних (pipeline) на основі машинного навчання для пошуку потенційних інгі-
біторів *Mycobacterium tuberculosis*.

Матеріали і методи. Використовуючи дані органічних сполук з бази ChEMBL,
було сформовано навчальну вибірку, описану за допомогою RDKit.
Реалізація проєкту виконана мовою Python у хмарному середовищі Google
Colab. Для машинного навчання використано модель XGBoost.

Результати й обговорення. Під час перевірки навченої моделі із використан-
ням моделі XGBoost показано високу точність класифікації. Здійснено аналіз
ключових структурних дескрипторів (зокрема, сумарної площі поверхні Ван-
дер-Ваальса атомів із високим позитивним частковим зарядом; незаміщеного
ароматичного кільця або із замісниками; ліпофільності алкільних та аро-
матичних фрагментів; карбонільних та піперидинових фрагментів; площі поверх-
ні Ван-дер-Ваальса атомів із певним електротопологічним станом – аро-
матичних та гідрофобних фрагментів молекул), що відповідають за активність.
Моделю протестовано на вибірці природних сполук. Виявлено три потенційні
кандидати: ChEMBL437538, ChEMBL108730, ChEMBL108980 як найбільш
перспективні речовини в якості претендентів на *in vitro* дослідження.

Висновки. Машинне навчання є ефективним інструментом в *in silico* дослі-
дженнях. Модель XGBoost демонструє низьку схильність до хибнопозитивних
результатів, а саме не пропускає молекули з відсутньою протитуберкульозною
активністю.

Вступ. Туберкульоз залишається однією з голо-
вних загроз для глобального здоров'я через зростання
резистентності штамів *Mycobacterium tuberculosis*
до наявних антибіотиків [1]. Пошук нових хемотипів
серед природних сполук є перспективним напяр-
мом досліджень. Методи *in silico*, зокрема машинне

навчання (Machine Learning, ML), дозволяють значно
прискорити первинний скринінг (virtual screening) та
знижити вартість розробки активного фармацевтич-
ного інгредієнта (АФІ). Протягом років програмісти
створювали різні підходи та методи, і XGBoost на
сьогодні став вершиною цієї еволюції [2].

Мета цієї роботи – розробити класифікаційну модель XGBoost на основі аналізу даних хімічних сполук органічного походження з використанням безкоштовної відкритої бази даних біоактивних хімічних молекул із лікарськими властивостями ChEMBL для прогнозування протитуберкульозної активності та провести скринінг вибірки природних сполук з метою виявлення нових потенційних хіміопрепаратів.



Матеріали і методи. Первинний набір органічних сполук було завантажено з бази даних ChEMBL за ідентифікатором цільового організму *Mycobacterium tuberculosis* (ChEMBL ID: ChEMBL360). Знайдені речовини відфільтрували за значенням показника мінімальної інгібуючої концентрації (MIC). Для активних сполук використали поріг $MIC < 1$ мкМ. За неактивні вважатимемо речовини з високим $MIC > 1000$ мкМ. Отримати дані для навчання моделі можна за допомогою скрипту (див. QR посилання на проєкт у Google Colab [3]). В результаті виконання Python скрипту отримуємо 256 активних і 1793 неактивних сполук. Для навчання моделі XGBoost потрібен датасет, що містить «активні» і «неактивні» речовини у співмірному співвідношенні. Оскільки неактивних речовин більше, тому кількість неактивних сполук випадковим чином зменшуємо до 302. Ті, що не були використані для навчання, будуть використані для тестування моделі на адекватність.

Для перетворення SMILES-формул хімічних сполук у цифровий формат для ML-моделі було використано бібліотеку RDKit (Python). Вона перетворює SMILES-формули на цифри двома шляхами: через класичні фінгерпрінти (Morgan Fingerprints – цифрові «відбитки» структури) та через фізико-хімічні властивості (молекулярна маса, LogP, розподіл електронної густини тощо). Ми використовуємо обидва методи,

що дозволяє моделі одночасно зрозуміти «правило п'яти» Ліпінського і враховувати конкретні хімічні групи та фрагменти. Таким чином, на цьому етапі ми отримали датасет зі 151 активної та 302 неактивних сполук. Для кожної окремої сполуки вказано близько сотні фізико-хімічних параметрів та більше двох тисяч молекулярних ознак (наприклад, кільця, функціональні групи, атомні послідовності, так звані біти). Це являє собою таблицю розмірністю 453 речовини на 2267 ознак.

Оскільки даних у нас небагато (453 сполуки), ми використовуємо стратегію Stratified K-Fold, що дозволить отримати максимум інформації із кожної молекули та отримати чесну оцінку точності. Однією з ключових функцій є `cross_val_score` з бібліотеки `scikit-learn` (модуль `sklearn.model_selection`), яка використовується для автоматизації процесу крос-валідації (перехресної перевірки) моделі машинного навчання. Вона розбиває вхідні дані на кілька частин (фолдів), по черзі навчає модель на одній групі частин і тестує її на тій, що залишилася. В результаті ми отримуємо масив (list) значень метрик якості (в нашому випадку це протитуберкульозна активність) для кожного ітераційного кроку перевірки. Потім за допомогою методів `fit` та `predict` отримуємо конкретні мітки класів (0 або 1) та ймовірності тої чи іншої ознаки, що у сукупності являє собою навчену модель.

Результати й обговорення. У результаті роботи Python скрипту – навчання та валідації моделі XGBoost – за результатами перехресної перевірки (k-fold cross-validation) отримуємо середній ROC-AUC: 0.928 (+/- 0.039). Це вказує на те, що модель продемонструвала високу прогностичну здатність, стабільність алгоритму та його ефективність у класифікації біоактивних сполук із бази ChEMBL. Функція `classification_report` з бібліотеки `sklearn.metrics` дає такий звіт за результатами навчання (таблиця 1).

Результати виглядають ідеальними (майже скрізь 1,00), що не дивно, адже для навчання було використано речовини з гарантовано високою та гарантовано відсутньою активністю проти туберкульозу (жодних посередніх чи невизначених активностей). Можна сказати, що на цьому датасеті передбачення протитуберкульозної активності є надто простим завданням («надто просте завдання» – це не форма мови, а термін у машинному навчанні, що вказує на ситуацію, коли складність моделі значно перевищує складність самих даних або мети навчання) [4]. Для тесту адекватності моделі оцінимо

Таблиця 1

Звіт згенерований функцією `classification_report` з бібліотеки `sklearn.metrics`

	precision	recall	f1-score	support
0	1,00	1,00	1,00	302
1	0,99	0,99	0,99	151
accuracy			1,00	453
macro avg	1,00	1,00	1,00	453
weighted avg	1,00	1,00	1,00	453

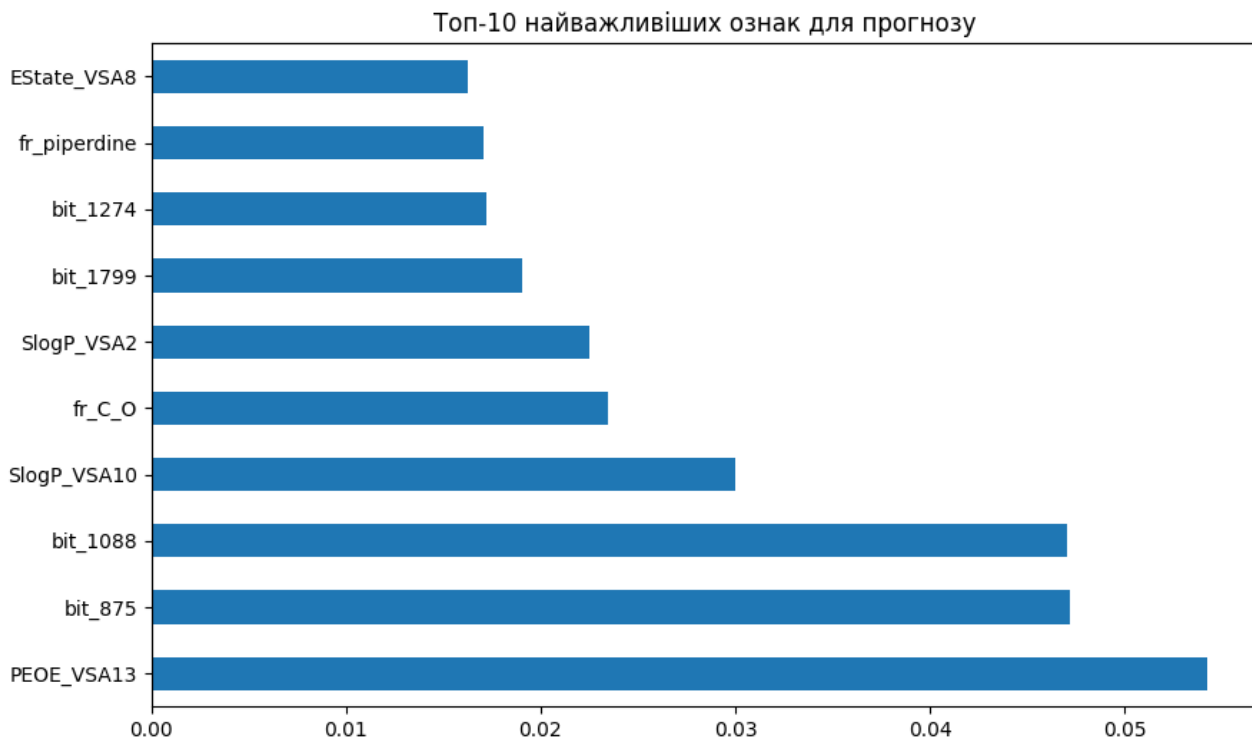


Рис. 1. Топ-10 дескрипторів за значущістю для моделі XGBoost

протитуберкульозну активність речовин завідомо неактивних, список яких у нас є, які ми випадковим чином відсіяли для навчання. В результаті отримали: максимальну ймовірність серед неактивних – 0,00%; середню ймовірність серед неактивних – 0,00%. Це свідчить про низьку схильність до хибнопозитивних результатів, модель стовідсотково не пропускає молекули з відсутністю протитуберкульозною активністю. Для першого тесту навченої моделі оцінюємо протитуберкульозну активність рифампіцину – відомого антибіотика від туберкульозу. Цієї речовини немає у списку для навчання моделі. Ймовірність протитуберкульозної активності – 69,74%. Також ми тестували класику від туберкульозу – ізоніазид. Його теж не було у списку для навчання. Ймовірність протитуберкульозної активності – 70,52%.

За допомогою аналізу важливості ознак (XGBoost Feature Importance) було визначено дескриптори, що мають найбільший внесок у прогноз протитуберкульозної активності.

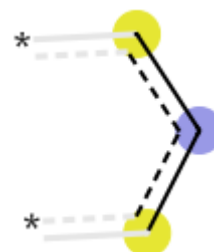
Аналіз важливості ознак моделі XGBoost показав, що одним із ключових дескрипторів протитуберкульозної активності є:

PEOE_VSA13 – характеризує сумарну площу поверхні Ван-дер-Ваальса атомів із високим позитивним частковим зарядом, розрахованим за методом Гастейгера-Марсілі. Висока значущість PEOE_VSA13 вказує на те, що наявність полярних електрондефіцитних центрів (таких як карбонільні групи, амідно- або сульфонамідні групи) [5], які, найімовірніше, відіграють вирішальну роль у зв'язуванні

сполук із цільовими макромолекулами *Mycobacterium tuberculosis* через утворення водневих зв'язків або електростатичних взаємодій [6; 7].



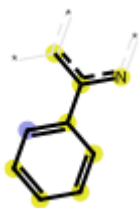
bit_875 – фрагмент молекули. Це може бути частина ароматичного циклу із не заміщеним карбоном у центрі та заміщеними карбонами по боках.



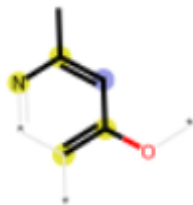
bit_1088 – фрагмент молекули. Це майже аналогічний фрагмент до попереднього, з тією різницею, що бічні атоми карбону не заміщені.

SlogP_VSA10 та SlogP_VSA2 – викликає особливий інтерес, одночасне виявлення моделлю XGBoost високої значущості двох протилежних за змістом дескрипторів ліпофільності – SlogP_VSA10 та SlogP_VSA2. Дескриптор SlogP_VSA10 відображає площу поверхні атомів із високим позитивним внеском у коефіцієнт розподілу (ліпофільні алкільні та ароматичні фрагменти), тоді як SlogP_VSA2 кодує зони з помірно негативним внеском (полярні гетероатоми Оксигену та Нітрогену) [5]. Дескриптор SlogP_VSA10 забезпечує пасивну трансклітинну дифузію крізь щільну «воскоподібну» міколічну оболонку *Mycobacterium tuberculosis* [8]. З іншого боку, наявність полярних гетероатомів у низьких діапазонах ліпофільності (SlogP_VSA2), за методом Кріппена, є необхідною умовою для утримання молекули в розчиненому стані у водних біологічних середовищах та для формування мережі водневих зв'язків із заглибленими полярними залишками білкової мішені [9].

fr_C_O та fr_piperidine – карбонільні та піперидинові фрагменти молекул відповідно. Досить типові фрагменти молекул, очевидно, модель «навчена» на їх обов'язковій присутності;



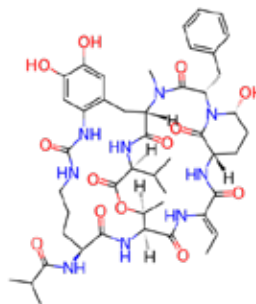
bit_1799 – фрагмент молекули.



bit_1274 – фрагмент молекули.

EState_VSA8 – відображає площу поверхні Ван-дер-Ваальса атомів із певним електростатичним станом (E-State за Кіром-Голлом). Цей дескриптор переважно кодує властивості ароматичних та гідрофобних фрагментів молекул [5; 10]. Той факт, що дескриптор EState_VSA8 має вагомий внесок у прогноз протитуберкульозної активності, цілком узгоджується з відомим правилом: ефективні інгібітори *Mycobacterium tuberculosis* повинні володіти строго специфічним гідрофобно-ліпофільним профілем, що необхідно як для успішного пасивного проникнення крізь щільну, багату на міколікові кислоти та ліпіди клітинну стінку мікобактерій [11], так і для забезпечення оптимального геометричного та електронного комплементаризму молекули з глибокими гідрофобними кишнями ключових білків-мішеней бактерії [12].

Було проскановано 10 тис. природних речовин із бази ChEMBL. З цього списку було видалено речовини, що входили у навчальний датасет. Модель згенерувала рейтинг ймовірності активності. У таблиці 2 наведено топ-сполуки з рейтингом > 0,85.

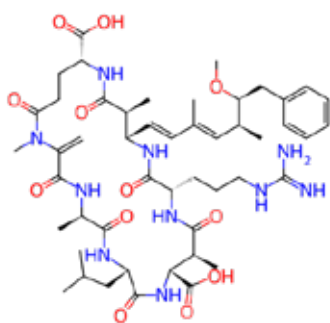


CHEMBL437538 – це ідентифікатор сполуки в базі даних ChEMBL, яка за хімічною будовою є циклічним депсипептидом родини Скіламіцинів (Skylamycins). Це один із природних ізомерів чи напівсинтетичних аналогів Skylamycin A / B / C. Відомо, що скіламіцини були відкриті під час дослідження вторинних метаболітів актиноміцетів (*Streptomyces*) і є інгібіторами PDGF-R та інгібіторами росту бактерій.

Таблиця 2

Природні сполуки з найвищим прогнозованим рейтингом протитуберкульозної активності

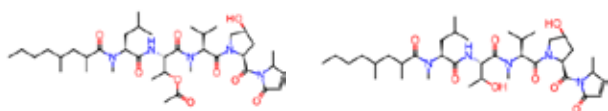
ChEMBL ID	Хімічний клас	Прогноз	Відома протитуберкульозна активність
CHEMBL437538	циклічний депсипептид	0,92	інформація відсутня
CHEMBL444092	циклічний гептапептид	0,91	токсин
CHEMBL108730	олігоамід	0,91	інформація відсутня
CHEMBL108980	олігоамід	0,90	інформація відсутня
CHEMBL421377	циклічний гептапептид	0,88	токсин
CHEMBL266974	циклічний пептид	0,87	так
CHEMBL281812	похідне динітро-бензаміду	0,87	немає



CHEMBL266974 – цей код описує суміш двох активних компонентів: капреоміцину IB (Capreomycin IB) та капреоміцину IA (Capreomycin IA).

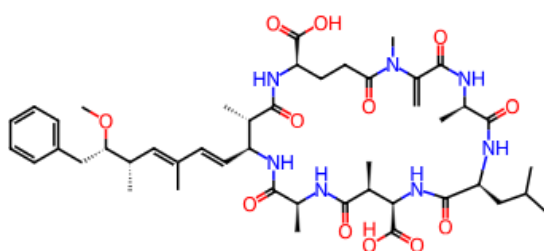
Разом вони становлять антибіотик Капреоміцин (Capreomycin). Це природний антибіотик (або суміш циклічних пептидів), який виробляється актинобактерією *Streptomyces capreolus* у процесі її життєдіяльності (вторинний метаболіт). За хімічною структурою це складний циклічний пептид, що містить рідкісні нестандартні амінокислоти (наприклад, капреоміцидин, дегідроаланін та β -лізин). У медичній практиці використовується як резервний протитуберкульозний препарат другого ряду для лікування важких та мультирезистентних форм туберкульозу.

CHEMBL444092 (також відома як Microcystin-LR) – це надзвичайно потужний природний токсин, що виробляється певними видами ціанобактерій (синьо-зелених водоростей). Це небезпечна сполука, що є об'єктом екологічних та токсикологічних досліджень.

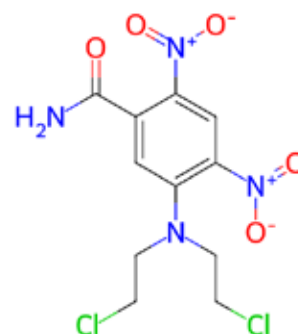
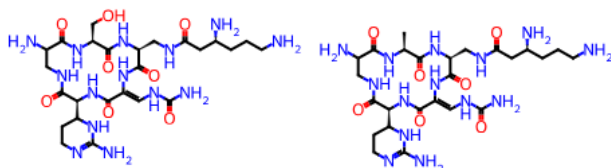


CHEMBL108730 та CHEMBL108980 – це невеликі олігоаміди.

Сполуки згадуються у дослідженнях як інгібітори певних ферментів у роботах, пов'язаних із пошуком нових терапевтичних агентів. Це синтетичні сполуки, створені в рамках фармакологічних досліджень як інгібітори/модулятори біологічних мішеней (зокрема, досліджувалася її дія на пептидази та білкові взаємодії). Вона не є первинним або вторинним метаболітом, виділеним безпосередньо з дикої природи.



CHEMBL421377 (також відома як Microcystin-LA) – це природна сполука, що належить до групи мікроцистинів – ціанотоксинів, які виробляються синьо-зеленими водоростями (ціанобактеріями), зокрема *Microcystis aeruginosa*. Циклічний гептапептид. Як і інші мікроцистини, CHEMBL421377 є потужним токсином.



CHEMBL281812 – цей код описує протипухлинну сполуку третазікар (Tretazicar), більш відому під лабораторним кодом CB 1954 (5-(біс(2-хлоретил)аміно)-2,4-динітробензамід). Сполука досить добре вивчена як потенційний алкілюючий протипухлинний агент. Про протитуберкульозну активність у дослідженнях не повідомляється.

Більшість речовин, що попали в топ протитуберкульозних препаратів, – це олігопептиди. Ми бачимо, що пептидного зв'язку немає в переліку Топ-10 дескрипторів за значущістю для моделі XGBoost, отже, надмірна увага ML-моделі до цього класу сполук зумовлена не важливістю, а частотою цього фрагменту молекули. Це може бути наслідком надмірної дефрагментації молекул навчального датасету. Усунення акцентуації ML-моделі на пептидні зв'язки дозволить побачити інші класи сполук. Алгоритми RDKit дозволяють варіювати розмір «відбитка пальців» молекули для оптимізації ML-моделі. Однак навіть у разі стандартних налаштувань модель знайшла сполуку (CHEMBL266974 – капреоміцин), для якої спостерігається співпадіння теоретичного прогнозу з реальними прямими або суміжними експериментальними даними протитуберкульозної активності. Це підтверджує, що модель виявила закономірності «структура–активність» (QSAR), притаманні саме протитуберкульозним агентам. Отже, серед запропонованих сполук можна вибрати ті, які не є токсинами і у яких протитуберкульозна активність не досліджена: CHEMBL437538, CHEMBL108730, CHEMBL108980.

Висновки.

1. Модель демонструє низьку схильність до хибно-позитивних результатів, отже, модель стовідсотково не пропускає молекули з відсутньою протитуберкульозною активністю.

2. Встановлено, що ключовими структурними чинниками протитуберкульозної активності за версією моделі є PEOE_VSA13, SlogP_VSA10 та SlogP_VSA2.

3. Проведено віртуальний скринінг 10 тис. природних сполук бази даних ChEMBL. Для багатьох сполук результати прогнозованої протитуберкульозної активності співпадають з реально дослідженою.

4. Відібрано три сполуки – ChEMBL437538, ChEMBL108730, ChEMBL108980 як найбільш перспективні речовини в якості претендентів на *in vitro* дослідження.

Обмеження дослідження. Основним обмеженням цього дослідження є використання ретроспективних даних із репозиторію ChEMBL, які були отримані з різних первинних літературних джерел. Це зумовлює певну гетерогенність експериментальних умов (таких як типи клітинних ліній або протоколи тестування). Крім того, результати, отримані за допомогою розробленого Python-скрипту, є виключно теоретичними (*in silico*) та відображають стан наповнення бази даних на момент релізу ChEMBL 37. Для остаточного підтвердження виявлених закономірностей необхідне проведення подальших біологічних випробувань *in vitro*.

Перспективи подальших досліджень. Удосконалення алгоритмів формування «відбитка пальців» молекули для оптимізації ML-моделі. Фільтрування списку природних речовин від сполук, які практично недоступні для випробувань *in vitro*, наприклад проміжних метаболітів, олігопептидів тощо.

Дотримання етичних норм. Дослідження не включає експериментів із залученням людей або живих організмів. Усі дані отримані з відкритих публічних джерел.

Інформація про фінансування. Дослідження не отримувало зовнішнього фінансування. Усі витрати, пов'язані з проведенням роботи, покривалися авторами самостійно.

Інформація щодо конфлікту інтересів. Автори заявляють, що не мають конфліктів інтересів між собою та установою проведення експерименту.

Внесок кожного з авторів: Г. Я. Загричук – розробка ідеї та формування концепції дослідження; Д. О. Польовий – програмування мовою Python та публікація коду у сховищі Google Colab; Л. А. Бойко – проведення огляду літератури; Л. М. Іванець – робота із відбором речовин з бази ChEMBL; Н. І. Гарліцька – тестування програмних алгоритмів.

Використання штучного інтелекту. Автори декларують, що інструменти штучного інтелекту були використані виключно як аналог пошукових систем для пошуку наукових публікацій за ключовими словами. Весь інтелектуальний аналіз, інтерпретація емпіричних даних та формулювання наукових висновків виконані авторами самостійно без залучення ШІ.

Первинні дані та матеріали. Дані про біологічну активність сполук були безкоштовно отримані з відкритої бази даних ChEMBL (версія ChEMBL_34). Згідно з правилами використання EMBL-EBI, доступ до інформації надається на умовах вільної ліцензії Creative Commons Attribution-ShareAlike 3.0 Unported (CC BY-SA 3.0). Доступ до даних отримано безкоштовно через REST API за допомогою мови програмування Python та бібліотеки *chembl_webresource_client*. Використання даних повністю відповідає Умовам використання EMBL-EBI та регулюється відкритою ліцензією CC BY-SA 3.0. Усі обчислювальні скрипти виконувалися на базі хмарної інфраструктури Google. Усі зображення структурних формул речовин взято з бази даних ChEMBL, яка поширюється за ліцензією CC BY-SA 3.0.

Подяка. Дослідження, викладене у статті, виконане в межах ініціативної науково-дослідної роботи «Використання методів дослідження *in silico* для пошуку біологічно активних сполук, які володіють протитуберкульозними, протидіабетичними, анорексогенними, антиоксидантними та антимікробними властивостями» © Тернопільський національний медичний університет імені І.Я. Горбачевського МОЗ України.

MACHINE LEARNING IN THE SEARCH FOR NEW ANTI-TUBERCULOSIS AGENTS: FROM ChEMBL DATABASE SCREENING TO THE CLASSIFICATION OF NATURAL COMPOUNDS

H. Ya. Zahrychuk, D. O. Poliovyi, L. A. Boiko, L. M. Ivanets, N. I. Garlitska

Ivan Horbachevsky Ternopil National Medical University of the Ministry of Health of Ukraine
zagrichuk@tdmu.edu.ua

Introduction. The study proposes a sequence of interrelated data-processing steps (pipeline) based on machine learning for the identification of potential inhibitors of *Mycobacterium tuberculosis*.

Materials and Methods. Using data on organic compounds obtained from the ChEMBL database, a training dataset was generated and characterized using RDKit descriptors. The project was implemented using Python in the Google Colab cloud environment. An XGBoost model was employed for machine learning.

Results and Discussion. Evaluation of the trained model using XGBoost demonstrated high classification accuracy. An analysis of key structural descriptors (in particular, the total van der Waals surface area of atoms with a high positive partial charge; unsubstituted aromatic rings or rings with substituents; the lipophilicity of alkyl and aromatic fragments; carbonyl

and piperidine fragments; the van der Waals surface area of atoms with a specific electrotopological state, particularly aromatic and hydrophobic molecular fragments) was performed. The model was subsequently tested on a set of natural compounds. Three potential candidates, ChEMBL437538, ChEMBL108730, and ChEMBL108980, were identified as the most promising compounds for further *in vitro* research.

Conclusions. Machine learning is an effective tool *in silico* research. The XGBoost model demonstrates a low propensity for false-positive results; specifically, it blocks molecules lacking antitubercular activity.

Keywords: machine learning, *in silico* research, active pharmaceutical ingredient, XGBoost, ChEMBL, minimum inhibitory concentration, *Mycobacterium tuberculosis*, RDKit, Python.

References

1. World Health Organization. Global Tuberculosis Report 2025 [Internet]. Geneva: WHO; 2025 [cited 2026 May 27]. Available from: <https://www.who.int/teams/global-programme-on-tuberculosis-and-lung-health/tb-reports/global-tuberculosis-report-2025>.
2. Chen T, Guestrin C. XGBoost: A scalable tree boosting system. In: Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining; 2016 Aug 13–17; San Francisco, CA. New York: ACM; 2016, p. 785–94.
3. Google Colab [Internet]. California: Google LLC; c2026 [cited 2026 Jul 26]. Available from: <https://colab.research.google.com/drive/1Cgb9D91z9YEhVU8cGhUMtdcFf5k-kkow?usp=sharing>.
4. Geirhos R, Jacobsen JH, Michaelis C, Zemel R, Brendel W, Bethge M, et al. Shortcut learning in deep neural networks. Nat Mach Intell. 2020;2(11):665–73. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2004.07780>.
5. RDKit: Open-source cheminformatics software [Internet]. RDKit documentation: Chem.MolSurf module. c2026 [cited 2026 Jul 26]. Available from: <https://www.rdkit.org/docs/source/rdkit.Chem.MolSurf.html>.
6. Labute P. A widely applicable set of molecular descriptors. J Mol Graph Model. 2000;18(4–5):464–77. [https://doi.org/10.1016/S1093-3263\(00\)00068-1](https://doi.org/10.1016/S1093-3263(00)00068-1).
7. Koštrun S, Munic Kos V, Matanović Škugor M. Around the macrolide – Impact of 3D structure of macrocycles on lipophilicity and cellular accumulation. Eur J Med Chem. 2017 Jun 16;133:351–364. <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2017.03.056>.
8. Nikaido H. Molecular basis of bacterial outer membrane permeability revisited. Microbiol Mol Biol Rev. 2003;67(4):593–656. <https://doi.org/10.1128/mmbr.67.4.593-656.2003>.
9. Wildman SA, Crippen GM. Prediction of physicochemical parameters by atomic contributions. J Chem Inf Comput Sci. 1999;39(5):868–73. <https://doi.org/10.1021/ci9903071>.
10. Hall LH, Mohny BK, Kier LB. The electrotopological state: an atom index for structure-property correlations. J Chem Inf Comput Sci. 1991;31(1):76–81. <https://doi.org/10.1021/ci00001a012>.
11. Brennan PJ, Nikaido H. The envelope of mycobacteria. Annu Rev Biochem. 1995;64:2–63. <https://doi.org/10.1146/annurev.bi.64.070195.000333>.
12. Dessen A, Quemard A, Blanchard JS, Jacobs WR, Sacchettini JC. Crystal structure and function of the isoniazid target of Mycobacterium tuberculosis. Science. 1995;267(5204):1638–43. <https://doi.org/10.1126/science.7886450>.

Відомості про авторів

Загричук Г. Я. – кандидат хімічних наук, доцент кафедри загальної хімії, Тернопільський національний медичний університет імені І. Я. Горбачевського Міністерства охорони здоров'я України, Тернопіль, Україна. E-mail: zagrichuk@tdmu.edu.ua, ORCID: 0000-0003-4361-1680

Польовий Д. О. – кандидат хімічних наук, доцент кафедри загальної хімії, Тернопільський національний медичний університет імені І. Я. Горбачевського Міністерства охорони здоров'я України, Тернопіль, Україна. E-mail: dpolov@tdmu.edu.ua, ORCID: 0000-0002-1036-9763

Бойко Л. А. – кандидат біологічних наук, доцент кафедри загальної хімії, Тернопільський національний медичний університет імені І. Я. Горбачевського Міністерства охорони здоров'я України, Тернопіль, Україна. E-mail: bojko@tdmu.edu.ua, ORCID: 0000-0001-5052-5604

Іванець Л. М. – кандидат хімічних наук, доцент кафедри загальної хімії, Тернопільський національний медичний університет імені І. Я. Горбачевського Міністерства охорони здоров'я України, Тернопіль, Україна. E-mail: ivanec@tdmu.edu.ua, ORCID: 0000-0003-1377-8025

Гарліцька Н. І. – кандидат біологічних наук, доцент кафедри загальної хімії, Тернопільський національний медичний університет імені І. Я. Горбачевського Міністерства охорони здоров'я України, Тернопіль, Україна. E-mail: burmas@tdmu.edu.ua, ORCID: 0000-0002-8553-7434

Information about the authors

Zahrychuk H. Ya. – PhD, Associate Professor at the Department of General Chemistry, Ivan Horbachevsky Ternopil National Medical University of the Ministry of Health of Ukraine, Ternopil, Ukraine. E-mail: zagrichuk@tdmu.edu.ua, ORCID: 0000-0003-4361-1680

Poliovyi D. O. – PhD, Associate Professor at the Department of General Chemistry, Ivan Horbachevsky Ternopil National Medical University of the Ministry of Health of Ukraine, Ternopil, Ukraine. E-mail: dpolov@tdmu.edu.ua, ORCID: 0000-0002-1036-9763

Boiko L. A. – PhD, Associate Professor at the Department of General Chemistry, Ivan Horbachevsky Ternopil National Medical University of the Ministry of Health of Ukraine, Ternopil, Ukraine. E-mail: bojko@tdmu.edu.ua, ORCID: 0000-0001-5052-5604

Ivanets L. M. – PhD, Associate Professor at the Department of General Chemistry, Ivan Horbachevsky Ternopil National Medical University of the Ministry of Health of Ukraine, Ternopil, Ukraine. E-mail: ivanec@tdmu.edu.ua, ORCID: 0000-0003-1377-8025

Garlitska N. I. – PhD, Associate Professor at the Department of General Chemistry, Ivan Horbachevsky Ternopil National Medical University of the Ministry of Health of Ukraine, Ternopil, Ukraine. E-mail: burmas@tdmu.edu.ua, ORCID: 0000-0002-8553-7434