II

II ВСЕУКРАЇНСЬКА НАУКОВО-ПРАКТИЧНА КОНФЕРЕНЦІЯ

з міжнародною участю

МІЖДИСЦИПЛІНАРНІ ПІДХОДИ ДО СТВОРЕННЯ ЛІКІВ

ЗБІРНИК ТЕЗ ДОПОВІДЕЙ

за матеріалами конференції

14–15 квітня 2026 року

ОРГАНІЗАТОРИ:

Міністерство освіти і науки України

Міністерство охорони здоров'я України

Національна академія наук України

Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

Запорізький державний медико-фармацевтичний університет

Фізико-хімічний інститут імені О. В. Богатського НАН України

Координаційна рада з проблеми
«Наукові основи створення лікарських препаратів»

ТДВ «ІНТЕРХІМ»

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ОДЕСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ імені І. І. МЕЧНИКОВА
Факультет хімії та фармації
ЗАПОРІЗЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ МЕДИКО-ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ФІЗИКО-ХІМІЧНИЙ ІНСТИТУТ ІМЕНІ О. В. БОГАТСЬКОГО НАН УКРАЇНИ
КООРДИНАЦІЙНА РАДА З ПРОБЛЕМИ «НАУКОВІ ОСНОВИ СТВОРЕННЯ ЛІКАРСЬКИХ ПРЕПАРАТІВ»
ТДВ «ІНТЕРХІМ»

МІЖДИСЦИПЛІНАРНІ ПІДХОДИ ДО СТВОРЕННЯ ЛІКІВ

Збірник тез доповідей ІІ Всеукраїнської науково-практичної конференції з міжнародною участю

Одеса, 14–15 квітня 2026 року

ОДЕСА
ОНУ імені І. І. Мечникова
2026

УДК 615.1/.3:615.012:061.3(043.2)
М58

Рекомендовано вченою радою факультету хімії
та фармації ОНУ імені І. І. Мечникова.
Протокол № 2 від 21.10.2025 р.

М58 **Міждисциплінарні** підходи до створення ліків [Електронний ресурс] : зб. тез доп. ІІ Всеукр. наук.-практ. конф. з міжнар. участю (Одеса, 14–15 квіт. 2026 р.) / за ред. О. О. Нефьодова, В. В. Менчука, Л. А. Расколи, А. О. Цісак. Електронні текстові дані (1 файл : 8,1 МБ). Одеса : ОНУ імені І. І. Мечникова, 2026. 486 с.

ISBN 978-966-186-407-7

У збірнику тез доповідей ІІ Всеукраїнської науково-практичної конференції з міжнародною участю «Міждисциплінарні підходи до створення ліків» обговорено роль інформаційних технологій в створені та впроваджені в медичну практику лікарських засобів, сучасні підходи до синтезу інноваційних лікарських препаратів, фармацевтичний аналіз, стандартизацію та контроль якості лікарських препаратів, актуальні проблеми доклінічного та клінічного вивчення лікарських засобів, а також особливості здійснення управлінсько-організаційних, маркетингових та соціально-економічних досліджень в фармацевтичній галузі та досвід і актуальні проблеми фармацевтичної освіти в умовах викликів сьогодення. Матеріали представлено в авторській редакції.

УДК 615.1/.3:615.012:061.3(043.2)

ISBN 978-966-186-407-7

© Автори статей, 2026
© Одеський національний університет імені І. І. Мечникова, 2026

STUDY OF THE ACTION OF KAEMPFEROL-LOADED BIONANOCOMPOSITES ON CORNEAL REGENERATION **69**
Beşliu Alina, Coretchi Ianos, Zaltariov Mirela-Fernanda, Chiaburu Andrei, Ciubotaru Bianca-Iulia, Casian Ana, Casian Igor, Cornelia Ceban, Pavlovschi Ecaterina

INNOVATIVE RESEARCH IN THE TREATMENT OF TYPE 2 DIABETES **72**
Maria Mihalachi-Anghel, Stela Bacinschi-Gheorghița, Caracaș Anastasia, Nicolae Bacinschi

NEW APPROACHES TO THE SYNTHESIS OF (+/-)-5-(3,4-DIHYDROXYPHENYL)-У-VALEROLACTONE (DHPV) AS A POTENTIAL DRUG **78**
Jadwiga Turło, Maciej Dawidowski, Kin Karyna, Afanasenko Olga

BIOLOGICALLY ACTIVE NATURAL BISNAPHTHOQUINONES **80**
Bacherikov V. A.

NOVEL DIHYDROPYRAZOLE DERIVATIVES: TARGETED LEADS FOR ANTICANCER THERAPY **86**
Liubomyr Havryshchuk, Roman Lesyk, Holota Serhii, Yuliia Kozak, Nataliya Finiuk

ВИКОРИСТАННЯ ЛІЗАТУ ТРОМБОЦИТІВ ЛЮДИНИ У КУЛЬТИВУВАННІ МЕЗЕНХІМАЛЬНИХ СТОВБУРОВИХ КЛІТИН **89**
Гелета Е. В., Гудзенко Т. В.

2-AMINOBENZOIC ACID HEXAFLUOROSILICATE AS A NEW POTENTIAL CARIES-PREVENTIVE AGENT **91**
Gelmboldt V. O., Shyshkin I. O., Kobenko K. R., Nechaieva D. S., Fonari M. S. , Kravtsov V. Ch.

МЕХАНІЗМ РАНОЗАГОЮВАЛЬНОЇ ДІЇ КАЛІЙ 5-(ФУРАН-2-ІЛ)-4-ФЕНІЛ-4Н-1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ТІОЛАТУ **94**
Ділягін О. А., Бушуєва І. В.

ZINC-DOPED HYDROXYAPATITES AS PROMISING MATERIALS FOR THE CREATION OF ORTHOPEDIC IMPLANTS **97**
Doroshchuk V. V., Lehenchuk O. V., Syrotchuk O. A., Chumachenko V. A., Panko A. V., Dybkova S. M., Zatovsky I. V.

INNOVATIVE STRATEGIES FOR CREATING NEW BIOLOGICALLY ACTIVE SUBSTANCES – POTENTIAL DRUGS **100**
Drapak Ya. M., Zimenkovsky B. S., Kaminsky D. V., Pinyazhko O. R., Matiychuk Yu. E., Drapak I. V.

ВАРІЮВАННЯ ТОПОЛОГІЇ ХІНОЛІН-ІЗОХІНОЛІН ЯК НАПРЯМОК ДИЗАЙНУ ФТОРХІНОЛОНОВИХ АНТИБІОТИКІВ **102**
Євсєєва Л. В., Василишин Р. Я., Коваль Н. В., Дорошенко А. О., Чебанов В. А., Георгіянц В. А., Коваленко С. М.

СУЧАСНІ ПІДХОДИ ДО СИНТЕЗУ ІННОВАЦІЙНИХ ЛІКАРСЬКИХ ПРЕПАРАТІВ **105**
Звєрєв В. М.

ЦІЛЕСПРЯМОВАНИЙ ПОШУК ІНГІБІТОРІВ ФОСФОЛІПАЗИ А2 СЕРЕД 1,8-ДИЗАМІЩЕНИХ ТЕОБРОМІНУ **107**
Іванченко Д. Г.

СИНТЕЗ ТА ХІМІЧНА МОДИФІКАЦІЯ S-ПОХІДНИХ 1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ТІОЛІВ, ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНИХ ТІОПІРИМІДИНОВИМ ФРАГМЕНТОМ, ЯК ПЛАТФОРМИ ДЛЯ СТВОРЕННЯ ІННОВАЦІЙНИХ ЛІКАРСЬКИХ КАНДИДАТІВ **110**
Карпенко Ю. В.

2-AMINOBENZOIC ACID HEXAFLUOROSILICATE AS A NEW POTENTIAL CARIES-PREVENTIVE AGENT

V. O. Gelmboldt [a], I. O. Shyshkin [a], K. R. Kobenko [a], D. S. Nechaieva [b], M. S. Fonari [c], V. Ch. Kravtsov [c]

[a] Odesa National Medical University, Odesa, Ukraine
[b] Institute of Organic Chemistry NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine
[c] Institute of Applied Physics, Moldova State University, Chisinau, Moldova

Introduction. Dental caries remains one of the important, socially significant health problems in most countries of the world [1] and therefore the search for new effective and safe anti-caries drugs is an urgent task of modern pharmacy. Fluoride drugs occupy a key position in existing caries treatment and prevention schemes. In the last decade, ammonium hexafluorosilicates (AHFS) have been actively studied as promising anti-caries agents [2, 3] and compounds with high caries-preventive effectiveness have been identified among them. The present report discusses the results of the synthesis, structure determination, and some physicochemical characteristics of 2-aminobenzoic acid hexafluorosilicate $[2\text{-}HO(O)CC_6H_4NH_3]_2SiF_6$ (**I**) as a new potential caries preventive agent.

Materials and methods. Commercial 2-aminobenzoic acid (L, qualified as «pure», Reachim) and fluorosilicic acid (FSA, 45 %, qualified as «pure for analysis», Reachim) were used as starting reagents in the present work. Organic solvents – methanol, ethanol, dimethyl sulfoxide (DMSO) – were not subject to additional purification.

X-ray structural analysis (XSA) was carried out on a Xcalibur E diffractometer (T = 293(2) K, two-coordinate Eos CCD-detector, graphite monochromator, MoKα-radiation) and X-ray diffraction analysis (XRD) on a powder Rigaku MiniFlex 600 diffractometer (CuKα-radiation).

The electron ionization EI mass spectra were recorded on an MX-1321 instrument (direct sample introduction into the source, ionizing electron energy 70 eV). IR absorption spectra were recorded on a Spectrum BX II FT-IR System (Perkin-Elmer) spectrophotometer (range 4000-350 cm^{-1}, samples as tablets with KBr). ^{1}H, ^{19}F NMR spectra were recorded using a Varian MercuryPlus and Varian Mercury 200 spectrometers (301.55, 188.13 MHz, respectively, solvents – D_2O, DMSO-d^6, internal standards – TMC, C_6F_6).

The determination of solubility was performed according to the requirements of State Pharmacopoeia of Ukraine [4].

Results and discussion. The synthesis of hexafluorosilicate **I** was carried out by reaction of a solution of L (0.607 g, 0.044 mol) in methanol (100 ml) with an excess of FSA (2.5 ml, molar ratio L : FSA ≈ 1 : 3). The yield of compound **I** (0.912 g) was close to quantitative.

Colorless single crystals of **I** were obtained by washing the synthesis product in the form of crystals covered with a brownish-brown film with 96 % ethanol on a filter.

The high purity of the single-crystal product was confirmed by XRD results.

The mass spectrum EI **I** contains peaks of the molecular ion $[ML]^{+\cdot}$ (*m/z* = 137, *I* = 51 %) and its fragmentation product $[ML–COOH]^{+\cdot}$ (*m/z* = 92, *I* = 69 %), as well as the ion $[SiF_3]^{+\cdot}$ (*m/z* = 85, *I* = 11 %) a characteristic product of the anion SiF_6^{2-} fragmentation.

According to X-ray diffraction data (Fig. 1), the ionic compound **I** crystallizes in the centrosymmetric space group *P*-1.

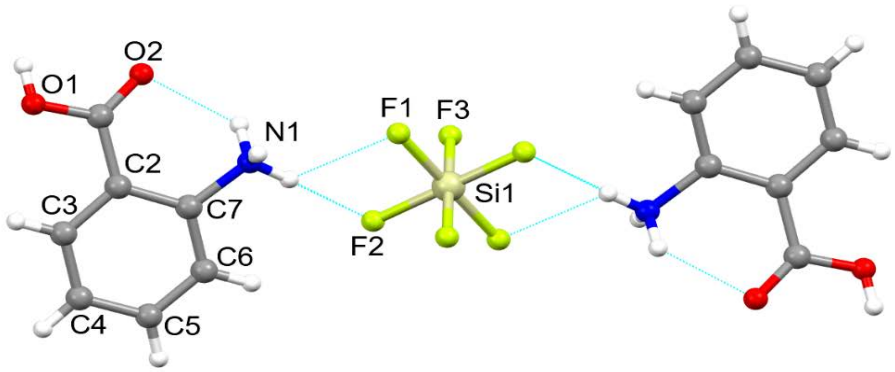

Fig. 1. Structure of complex **I** with indication of H-bonds

The components of the structure – LH^+ cations and SiF_6^{2-} anions (Si–F bonds in the range 1.6739(10)-1.6835(12) Å, FSiF bond angles – 89.07(6)-90.49(7) °) are united by NH···F, OH···F, NH···O H-bonds and CH···F contacts. All three hydrogen atoms of the ammonium fragment are involved in three bifurcated H-bonds with the participation of O and F atoms as H-acceptors. In structure **I,** stacking interactions between the benzene rings of cations are also realized (the shortest C···C distance between fragments is 3.236 Å).

In the IR spectrum of salt **I**, intense vibration bands of $\nu(NH_3^+)$ and ν(OH) cations are recorded at 3480-3090 cm^{-1} and 2638-2518 cm^{-1}, respectively, vibrations of ν(SiF) and $\delta(SiF_2)$ anion are detected in characteristic regions of the spectrum at

753, 714 cm^{-1} and 483, 435 cm^{-1}. The ν(SiF) bands may also include deformation vibrations of cations ρ(CH_2) and δ(CCH). The doublet structure of the ν(SiF) and δ(SiF_2) vibrations may indicate a decrease in the symmetry of the SiF_6^{2-} anion relative to the regular octahedral O_h due to the inclusion of fluorine atoms in NH···F and OH···F H-bonds.

The ^{19}F NMR spectrum of aqueous solution of **I** reveal the singlet signal with the chemical shift δ(^{19}F) = –129.88 ppm, and for solution **I** in DMSO medium the chemical shift δ(^{19}F) = –139.13 ppm. The given spectral parameters are specific for the octahedral SiF_6^{2-} anion.

According to **I** solubility determination data, the solubility values of the salt correspond to the characteristic “moderately soluble” (in water, methanol, ethanol, and DMSO). The established nature of the solubility of **I** in the used series of solvents does not correspond to the previously established general trend of changes in the solubility of AHFS with pyridinium cations in the indicated solvents “water (freely soluble) > DMSO (soluble) > methanol (very slightly soluble) ≥ ethanol (very slightly soluble)” [5].

Further studies of the biological activity of **I** are planned.

References:

1. Pitts N.B., Zero D.T., Marsh P.D., Ekstrand K., Weintraub J.A., Ramos-Gomez F., Tsakos G., Twetman S., Tagami J., Ismail A. Dental caries // Nat. Rev. Dis. Primers. 2017. V. 3. 17030.
2. Гельмбольдт В.О., Анісімов В.Ю. Амонієві гексафторосилікати: новий тип антикарієсних агентів // Фарм. журнал. 2018. № 5-6. С. 48-69.
3. Gelmboldt V.O., Kravtsov V.Ch., Fonari M.S. Ammonium hexafluoridosilicates: Synthesis, structures, properties, applications // J. Fluorine Chem. 2019. V. 221, № 5. P. 91-102.
4. Державна фармакопея України / ДП «Український науковий фармакопейний центр якості лікарських засобів». 1-е вид., 4 допов. Х.: Держ. п-во «Український науковий фармакопейний центр якості лікарських засобів», 2011. 540 с.
5. Gelmboldt V.O. Solubility and hydrolysis of ammonium hexafluorosilicates as potential pharmaceuticals (a review) // Voprosy khimii i khimicheskoi tekhnologii. 2024. № 3. P. 16-29.