



Міністерство охорони здоров'я України
Міністерство освіти і науки України
Національний фармацевтичний університет
Кафедра фармацевтичної хімії
Кафедра медичної хімії
Кафедра загальної хімії
Кафедра аналітичної хімії та аналітичної токсикології

Міжнародна internet-конференція

Modern chemistry of medicines

18 травня 2023 р.
м. Харків, Україна

Повідчення Державної наукової
установи «Український інститут
науково-технічної експертизи та
інформації» № 550 від 19.12.2022 року

Міністерство охорони здоров'я України
Міністерство освіти і науки України
Національний фармацевтичний університет
Кафедра фармацевтичної хімії
Кафедра медичної хімії
Кафедра загальної хімії
Кафедра аналітичної хімії та аналітичної токсикології

Ministry of health of Ukraine
Ministry of education and science of Ukraine
National university of pharmacy
Pharmaceutical chemistry department
Medicinal chemistry department
General chemistry department
Analytical chemistry and analytical toxicology department

MODERN CHEMISTRY OF MEDICINES

Матеріали
Міжнародної Internet-конференції «Modern chemistry of medicines»,
18 травня 2023 року

Materials
of the International Internet Conference 'Modern chemistry of medicines',
May 18, 2023

ХАРКІВ
KHARKIV
2023

УДК 615.3(06)

М 78

Електронне видання мережне

Редакційна колегія: проф. Котвіцька А. А., проф. Владимірова І. М., проф. Георгіянц В.А., проф. Перехода Л.О., проф. Журавель І.О., проф. Колісник С.В., доц. Криській О.С., проф. Власов С.В., ас. Смелова Н.М., ас. Григорів Г.В.

Конференція зареєстрована в УкрІНТЕІ (посвідчення № 550 від 19.12.2022 р.)

M78 **Modern** chemistry of medicines: матеріали Міжнародної Internet-конференції «Modern chemistry of medicines» (18 травня 2023 р., м. Харків) – Електрон. дані. – Х. : НФаУ, 2023. – 284 с. – Назва з тит. екрана.

Збірник містить матеріали Міжнародної Internet-конференції «Modern chemistry of medicines» (18 травня 2023 р., м. Харків) присвячені висвітленню сучасних тенденцій створення оригінальних АФІ синтетичного та рослинного походження, фармацевтичної розробки, забезпечення якості лікарських засобів.

Для широкого кола наукових та практичних фахівців у галузі фармації та медицини, магістрантів, аспірантів, докторантів, співробітників фармацевтичних підприємств, викладачів закладів вищої освіти.

Редколегія не завжди поділяє погляди авторів.

Автори опублікованих матеріалів несуть повну відповідальність за підбір, точність наведених фактів, цитат, економіко-статистичних даних, власних імен та інших відомостей.

Матеріали подаються мовою оригіналу.

УДК 615.3(06)

© НФаУ, 2023

UNEXPECTED CONVERSION OF 2-AMINOPHENYLACETIC ACID HEXAFLUOROSILICATE TO 2-OXINDOL UNDER MILD CONDITIONS

Lytvynchuk I.V.¹, Fonari M.S.², Kravtsov V.Ch.², Gelmboldt V.O.¹

¹ *Odessa National Medical University, Odessa, Ukraine*

² *Institute of Applied Physics, Moldova State University, Chisinau, Moldova*
vgelmboldt@te.net.ua

Introduction. Fluoride therapy is known to be the most effective and safe method of caries treatment. In recent years, ammonium hexafluorosilicates, including salts with biologically active cations, have been actively studied as promising anti-caries agents. Considering the literature data, significant pharmacological potential is expected for aminoacids hexafluorosilicates. Previously we have carried out the synthesis of 2-, 3-, 4-aminophenylacetic acids hexafluorosilicates (2-, 3-, 4-ApHFS), an attempt to recrystallize them from ethanol led to the formation of a red crystalline product in the case of 2-ApHFS. The purpose of this work is to determine the composition and structure of the 2-ApHFS recrystallization product.

Materials and methods. The synthesis of 2-ApHFS was carried out by the reaction of a solution of 2-aminophenylacetic acid in methanol with 45% hydrofluorosilicic acid (molar ratio 1 : 6). Mass spectra of EI and FAB were recorded on MX-1321 and VG 7070 (VG Analytical) spectrometers, X-ray diffraction analysis (XRD) was performed on an Xcalibur E diffractometer. The SHELX97 software package was used to solve the structure and refine the model.

Results and discussion. The appearance of the starting compound 2-ApHFS and its recrystallization product (RP) differ significantly: light brown amorphous 2-ApHFS and red crystalline RP. The mass spectra of 2-ApHFS and RP also differ. In particular, the mass spectrum of EI RP does not contain peaks of the molecular ion of 2-aminophenylacetic acid $[ML]^+$ ($m/z = 151$) and $[SiF_3]^+$ ion ($m/z = 85$) – characteristic product of anion SiF_6^{2-} fragmentation. At the same time, the characteristics of the EI RP mass spectrum practically coincide with those of the tabulated mass spectrum of 2-oxindole (2-OXIND). Thus, a peak of the molecular ion 2-OXIND ($m/z = 133$, $I = 100\%$) is registered in the mass spectrum of RP. Structural confirmation of the formation of 2-OXIND as a recrystallization product of 2-ApHFS was obtained by X-ray diffraction analysis. Crystals RP are monoclinic: C_8H_7NO , $M = 133.15$, $a = 14.4160(8)$, $b = 13.1563(6)$, $c = 7.0788(5)$ Å, $\beta = 101.941(6)^\circ$, $V = 1313.52(14)$ Å³, sp. gr. $P2_1/c$, $Z = 8$, $D_{calc.} = 1.347$ Mg/m³, $\mu = 0.090$ mm⁻¹, $F(000) = 560$. According to X-ray diffraction data, the isolated RP is a monoclinic polymorph of 2-OXIND with two independent ligand molecules in the asymmetric part of the cell.

Conclusions. Thus, the product of recrystallization of 2-ApHFS from ethanol is 2-OXIND, whose structure was determined by mass spectrometry and X-ray diffraction. The result obtained indicates the ease of destruction of 2-ApHFS under extremely mild conditions, which excludes the possibility of purification of this salt by sublimation and recrystallization methods.