



НАУКОВО-ПРАКТИЧНА КОНФЕРЕНЦІЯ  
З МІЖНАРОДНОЮ УЧАСТЮ,  
присвячена 110-річчю  
з дня народження  
І. В. САВИЦЬКОГО



# СУЧАСНІ ТЕОРЕТИЧНІ ТА ПРАКТИЧНІ АСПЕКТИ КЛІНІЧНОЇ МЕДИЦИНИ

(для студентів та молодих вчених)

22–23 квітня 2021 року

**Тези доповідей**



ОДЕСЬКИЙ  
МЕДИУНІВЕРСИТЕТ





НАУКОВО-ПРАКТИЧНА КОНФЕРЕНЦІЯ  
З МІЖНАРОДНОЮ УЧАСТЮ,  
присвячена 110-річчю з дня народження  
І. В. САВИЦЬКОГО



# СУЧАСНІ ТЕОРЕТИЧНІ ТА ПРАКТИЧНІ АСПЕКТИ КЛІНІЧНОЇ МЕДИЦИНИ

(для студентів та молодих вчених)

22–23 квітня 2021 року

**Тези доповідей**



ОДЕСЬКИЙ  
МЕДУНІВЕРСИТЕТ

УДК 06.091.5:061.3:61-057.875  
С 91

***Головний редактор:***

ректор, академік НАМН України,  
проф. В. М. Запорожан

***Заступники голови:***

в. о. проректора з науково-педагогічної роботи,  
з. д. н. т. України, проф. О. О. Шандра,  
науковий керівник Ради СНТ та ТМВ  
проф. О. Г. Юшковська

***Редакційна колегія:***

проф. Р. С. Вастьянов, проф. В. Г. Марічереда,  
проф. А. С. Сон, доц. К. О. Талалаєв,  
проф. І. П. Шмакова

**Сучасні** теоретичні та практичні аспекти клінічної медицини  
С 91 (для студентів та молодих вчених) : наук.-практ. конф. з міжнар.  
участю, присвячена 110-річчю з дня народження І. В. Савицького.  
Одеса, 22–23 квітня 2021 року : тези доп. — Одеса : ОНМедУ, 2021.  
— 168 с.

ISBN 978-966-443-104-7

У тезах доповідей науково-практичної конференції з міжнародною участю для студентів та молодих вчених, присвяченої 110-річчю з дня народження І. В. Савицького, подаються стислі відомості щодо результатів наукової роботи, виконаної учасниками конференції.

УДК 06.091.5:061.3:61-057.875

## ВІРТУАЛЬНИЙ СКРИНІНГ ПОХІДНИХ ПІРИДИНУ ЯК КОМПОНЕНТІВ ПОТЕНЦІЙНИХ АНТИКАРІЄСНИХ АГЕНТІВ

Олексюк К. М., Литвинчук І. В.

Одеський національний медичний університет,  
Одеса, Україна

Як відомо, похідні піридину володіють широким спектром біологічної активності. Продуктами взаємодії піридинів з кремнійфтороводневою кислотою є амонієві гексафторосилікати (АГФС), для яких в експерименті встановлено високу антикарієсну активність. В роботі проведено віртуальну оцінку прояву протизапальної (ПЗА) та інших видів активності, а також ліпофільності у ряду похідних піридину, що містять протизапальні фармакофорні групи, з метою вибору кандидатів для синтезу АГФС як антикарієсних агентів.

**Матеріали та методи.** Об'єкти дослідження — комерційно доступні похідні піридину (26 сполук, база даних PubChem), що містять протизапальні фармакофори — залишки оцтової, пропіонової, фенілоцтової кислот. Оцінку потенційної біологічної активності було проведено з використанням програми PASS 2017 Professional. Значення ліпофільності  $\log P$  розраховували з використанням пакетів програм ALOGPS, KowWin, моделі QSPR.

**Результати.** За даними розрахунків, в ряду похідних оцтової кислоти найбільша ймовірність наявності ПЗА очікується для сполук 2-, 3-, 4-НО(О)ССН<sub>2</sub>С<sub>5</sub>Н<sub>4</sub>Н ( $P_a = 0,454, 0,506, 0,537$  відповідно), причому введення другого замісника в піридиновий цикл призводить до зниження значень  $P_a$ . Аналогічний тренд спостерігається в ряду 2-, 3-, 4-заміщених похідних фенілоцтової і пропіонової кислот (однак  $P_a < 0,5$ ). Встановлено відсутність помітної ймовірності проявлення гепатотоксичності і нефротоксичності для всіх вивчених похідних піридину ( $P_a < 0,5$ ). За даними віртуального аналізу в трьох наближеннях, значення ліпофільності  $\log P$  всіх похідних піридину знаходяться в межах — 2,65 ч 2,26. Таким чином, всі вивчені похідні піридинів відносяться до малотоксичних «drug-like» сполук. Незважаючи на наявність у складі вивчених піридинів фармакофорів, які пов'язуються з ПЗА, практично для всіх структур ймовірність прояву зазначеного типу активності невелика.

## ВИВЧЕННЯ ФІЗИКО-ХІМІЧНИХ І АДсорбційних властивостей ПРИРОДНИХ АЛЮМОСИЛКАТІВ УКРАЇНИ

Голубчик Х. О., Кошева О. А.

Одеський національний медичний університет,  
Одеса, Україна

Кліноптилоліт та вермикуліт — алюмосилікати, що широко застосовуються у різних галузях техніки та науки — від очистки стічних вод різних підприємств, в тому числі фармацевтичних, до іммобілізації на них діючої речовини лікарсь-

ких засобів. Тому вивчення фізико-хімічних та адсорбційних властивостей таких речовин є важливою задачею для вирішення вище вказаних питань. Зразки природних кліноптилоліту (П-Кл) та вермикуліту (П-Вр) досліджено методами ІЧ-спектроскопії, рентгенофазового аналізу, сканівної електронної мікроскопії, також вивчено адсорбційні можливості стосовно йонів купруму ( $\text{Cu}^{2+}$ ).

Зразки виявилися поліфазними: у П-Кл домінуючою фазою є кліноптилоліт (близько 70 %), в якості домішкових фаз виявлено а-кварц, морденіт та інші. У П-Вр основною фазою є вермикуліт з невеликими домішками а-кварц та заліза.

ІЧ-спектри характеризуються відповідними смугами коливань в областях 400-1000  $\text{cm}^{-1}$ , що відносяться до валентних та деформаційних коливань структурних фрагментів Si-O. Також виявлено характерні смуги коливань молекул адсорбованої води в областях близько 1600  $\text{cm}^{-1}$  та 3400-3200  $\text{cm}^{-1}$ .

Адсорбцію йонів  $\text{Cu}^{2+}$  з водних розчинів проводили досліджували при 20 °С в статичних умовах, постійно струшуючи колбу, протягом 2 годин (час встановлення рівноваги); співвідношення маса зразка : об'єм розчину = 1 : 100. Ізотерми адсорбції купруму(II) мають подібну форму, що вказує на однаковий механізм адсорбції, який віднесено до L-типу. Можна зробити наступні висновки: рівняння Ленгмюра добре описує експериментальні результати адсорбції  $\text{Cu}^{2+}$  зразками П-Кл і П-Вр (значення  $R^2$  наближаються до одиниці).

## ГЕКСАФТОРОСИЛКАТИ ПІРИДИНПРОПІОНОВИХ КИСЛОТ: СИНТЕЗ, СПЕКТРАЛЬНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ, РОЗЧИННІСТЬ

Подуст Т. О., Шишкін І. О.

Одеський національний медичний університет,  
Одеса, Україна

Амонієві гексафторосилікати з біологічно активними катіонами є перспективними агентами для лікування і профілактики карієсу. Метою цієї роботи є синтез та вивчення фізико-хімічних характеристик нових субстанцій, гексафторосилікатів 2-, 3-, 4-заміщених похідних піридинпропіонових кислот і тіотриазоліну, катіони яких містять протизапальні фармакофори — залишки пропіонової та оцтової кислот.

**Матеріали та методи.** У роботі використовували комерційні 2-, 3-, 4 — піридинпропіонові кислоти ( $L^1 — L^3$ , Sigma Aldrich, 99 %), тіотриазолін (ТТАЗ) та кремнійфтороводневу кислоту (45 %, ЧДА, Реакхим). ІЧ-спектри поглинання реєстрували на спектрофотометрі Spectrum BX II FT-IR System (Perkin-Elmer), мас-спектри EI — спектрометрі MX-1311. Визначення розчинності гексафторосилікатів проводили відповідно до рекомендацій ДФУ.

**Результати.** Синтез гексафторосилікатів здійснювали шляхом реакції між метанольним розчином відповідної органічної основи і розчином 45