

CURRENT CHEMICAL PROBLEMS (CCP-2020)

ISSN print 2708-0536
ISSN on-line 2708-0544

**Vasyl' Stus Donetsk National University
L. M. Litvinenko Institute of Physical-Organic
Chemistry and Coal Chemistry**

**III INTERNATIONAL (XIII UKRAINIAN)
SCIENTIFIC CONFERENCE
FOR STUDENTS AND YOUNG SCIENTISTS**

CURRENT CHEMICAL PROBLEMS

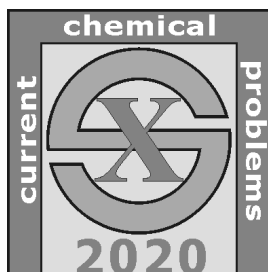


ABSTRACT BOOK

Vinnytsia 2020

**MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF UKRAINE
NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF UKRAINE
VASYL' STUS DONETSK NATIONAL UNIVERSITY
L. M. LITVINENKO INSTITUTE OF PHYSICAL-ORGANIC
CHEMISTRY AND COAL CHEMISTRY**

CURRENT CHEMICAL PROBLEMS



**III International (XIII Ukrainian) scientific conference
for students and young scientists**

BOOK OF ABSTRACTS

**March 25–27, 2020
Vinnytsia**

*Approved by the Academic Council of Vasyl' Stus Donetsk National University
(minutes N 9, 28.02.2020)*

Current chemical problems (CCP-2020): book of abstracts of the III International (XIII Ukrainian) scientific conference for students and young scientists, March 25–27, 2020, Vinnytsia / Vasyl' Stus Donetsk National University; editorial board: O. M. Shendrik (editor-in-chief) [et al.]. Vinnytsia, 2020. 212 p.

III International (XIII Ukrainian) scientific conference for students and young scientists "Current Chemical Problems" (CCP-2020) was held at Vasyl' Stus Donetsk National University on March 25–27, 2020.

The book of abstracts contains the results of investigations, obtained in the educational and research establishments of Ukraine, Republic of Belarus, Republic of Azerbaijan, Russian Federation, Republic of Moldova, Republic of Poland, Republic of Estonia, Republic of Slovenia, Republic of Latvia, Federal Republic of Germany in the fields of analytical, quantum, inorganic, organic, physical, medicinal and pharmaceutical chemistry, biochemistry, chemical education, chemical engineering, chemistry of polymers and composites.

Conference partners:

UkrChemAnalysis Ltd.

Otava Ltd.

Association of Perfumery and Cosmetics of Ukraine

Vasyl' Stus DonNU Student Council

Chemlaborreactive Ltd.

Vinnytsia Chamber of Commerce and Industry

"INSTRUMENT-SERVIS"

"ALSI-Chrom"

"MixLab"

UkrOrgSyntez Ltd.

Editorial board: O. M. Shendrik (ed.-in-ch.)

S. V. Zhylytsova (executive secretary)

I. O. Opejda

S. V. Radio

G. M. Rozantsev

O. M. Shved

Editorial board address: 21021, Vinnytsia, vul. 600-richchia, 21, Faculty of Chemistry, Biology and Biotechnologies of Vasyl' Stus Donetsk National University.

© Vasyl' Stus DonNU, 2020

© Authors, 2020

© O. M. Shendrik (ed.-in-ch.), 2020

ISSN print 2708-0536

ISSN on-line 2708-0544

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ДОНЕЦЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТУСА
ІНСТИТУТ ФІЗИКО-ОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ І ВУГЛЕХІМІЇ
ІМ. Л. М. ЛИТВИНЕНКА НАН УКРАЇНИ

ХІМІЧНІ ПРОБЛЕМИ СЬОГОДЕННЯ



III Міжнародна (XIII Українська) наукова конференція
студентів, аспірантів і молодих учених

ЗБІРНИК ТЕЗ ДОПОВІДЕЙ

25–27 березня 2020 р.
м. Вінниця

*Затверджено Вченою радою Донецького національного університету
імені Василя Стуса (протокол № 9 від 28.02.2020 р.)*

Хімічні проблеми сьогодення (ХПС-2020): збірник тез доповідей III Міжнародної (XIII Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених, 25–27 березня 2020 р., м. Вінниця / Донецький національний університет імені Василя Стуса; редколегія: О. М. Шендрик (відп. ред.) [та ін.]. Вінниця, 2020. 212 с.

З 25 по 27 березня 2020 року в Донецькому національному університеті імені Василя Стуса відбулася III Міжнародна (XIII Українська) наукова конференція студентів, аспірантів і молодих учених «Хімічні проблеми сьогодення» (ХПС-2020).

У збірнику опубліковані результати досліджень, які виконані в навчальних закладах і наукових установах України, Білорусі, Азербайджану, Російської Федерації, Молдови, Польщі, Естонії, Словенії, Латвії, Німеччини в галузях аналітичної, квантової, неорганічної, органічної, фізичної, медичної та фармацевтичної хімії, біохімії, хімічної освіти, хімічної інженерії, хімії полімерів і композитів.

Партнери конференції:

ТОВ «УкрХімАналіз»
Науково-сервісна фірма «ОТАВА»
Асоціація «Парфумерія та косметика України»
Студентська рада ДонНУ імені Василя Стуса
ТОВ «Хімлаборреактив»
Вінницька торгово-промислова палата
Приватне підприємство «Інструмент-Сервіс»
ТОВ «АЛСІ-ХРОМ»
ТОВ «МіксЛаб»
ТОВ «НВП «Укроргсинтез»

Редакційна колегія: О. М. Шендрик (відп. ред.)
С. В. Жильцова (відп. секр.)
Й. О. Опейда
С. В. Радіо
Г. М. Розанцев
О. М. Швед

Адреса редколегії: 21021, м. Вінниця, вул. 600-річчя, 21, факультет хімії, біології і біотехнологій Донецького національного університету імені Василя Стуса.

© ДонНУ імені Василя Стуса, 2020
© Колектив авторів, 2020
© О. М. Шендрик (відп. ред.), 2020

PROGRAMME COMMITTEE

Chairman: *Prof. Oleksandr Shendrik*, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Vice-chairman, scientific secretary: *Dr. Svitlana Zhylytsova*, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Prof. Serhii Bogza, Institute of Organic Chemistry NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

Dr. Maksym Chekanov, Institute of Molecular Biology and Genetics NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

Prof. Yevgen Get'man, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Dr. Mykhailo Frasyniuk, Institute of Bioorganic Chemistry and Petrochemistry NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

Dr. Olena Khyzhan, National University of Life and Environmental Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine

Prof. Mykola Korotkikh, Institute of Organic Chemistry NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

Prof. Olga Kushch, L. M. Litvinenko Institute of Physical-Organic Chemistry and Coal Chemistry NAS of Ukraine, Lviv, Ukraine

Dr. Yulia Lesishina, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Prof. Wojciech Macyk, Jagiellonian University in Kraków, Kraków, Poland

Prof. Anatolii Matvienko, L. M. Litvinenko Institute of Physical-Organic Chemistry and Coal Chemistry NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

Dr. Stéphane Mazières, Paul Sabatier University (Toulouse III), Toulouse, France

Dr. Vasyl' Mel'nichenko, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Dr. Saulius Mickevicius, Vytautas Magnus University, Kaunas, Lithuania

Prof. Josyp Opeida, Department of Physical Chemistry of Fossil Fuels, L. M. Litvinenko Institute of Physical-Organic Chemistry and Coal Chemistry NAS of Ukraine, Lviv, Ukraine

Prof. Anatolii Popov, L. M. Litvinenko Institute of Physical-Organic Chemistry and Coal Chemistry NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

Dr. Serhii Radio, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Prof. Anatolii Ranskii, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia, Ukraine

Dr. Andrii Red'ko, L. M. Litvinenko Institute of Physical-Organic Chemistry and Coal Chemistry NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

Prof. Georgii Rozantsev, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Prof. Volodymyr Rybachenko, L. M. Litvinenko Institute of Physical-Organic Chemistry and Coal Chemistry NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

Prof. Peter J. Skabara, School of Chemistry, University of Glasgow, Scotland, United Kingdom

Prof. Ihor Shpanko, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Prof. Olena Shved, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

LOCAL ORGANIZING COMMITTEE

Olha Zosenko, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Dmytro Kyrychenko, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Dr. Natalya Leonova, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Oleksandra Mariichak, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Yuliia Oleksii, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Mykhailo Parysh, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Olexandr Tsiapalo, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Tetiana Vakarchuk, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Kseniia Yutilova, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

**BIOCHEMISTRY /
БІОХІМІЯ**

ДОСЛІДЖЕННЯ *IN SILICO* МЕТАБОЛІЗМУ МЕТІОНІНУ В ЕРИТРОЦИТАХ ЛЮДИНИ ТА ЙОГО РОЛІ У ПІДТРИМЦІ ЖИТТЄЗДАТНОСТІ КЛІТИН

Доценко О. І., Громадська Я. О.

Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна
o.dotsenko@donnu.edu.ua

У попередніх дослідженнях (Dotsenko, 2019) було показано, що реакції циклу метіоніну можуть бути залучені у процеси, спрямовані на подовження часу життя еритроцитів з мутантними формами гліколітичних ферментів, зокрема глюкозофосфатізомеразою. У літературі є окремі відомості про наявність деяких метаболітів циклу в еритроцитах та їх роль у процесах метилювання, зниження окисного навантаження та підтримки синтезу глутатіону. Дотепер невідома роль гомоцистеїну та фолатів в еритроцитах, хоча рівень фолатів цих клітин використовується для діагностики низки захворювань. Кінетичні механізми реакцій циклу метіоніну в еритроцитах практично не досліджені. Складність метаболізму метіоніну, а також проблеми, пов'язані з експериментальним дослідженням його регуляції, роблять математичне моделювання перспективним методом вивчення роботи метаболічної мережі еритроцитів. У зв'язку з цим, мета роботи полягала створенні математичної кінетичної моделі циклу метіоніну в еритроцитах та дослідженні його впливу на функціонування інших метаболічних циклів клітини.

Центральний вуглецевий метаболізм змодельовано з використанням моделі Holzhütter, в якій 38 диференціальних рівнянь були побудовані на основі точних кінетичних рівнянь. До моделі були залучені реакції відновлення метгемоглобіну цитоплазматичними NADH-залежною *cytb5-* і FMN-залежною редуктазами, цикл регенерації нуклеотидів, та цикл синтезу глутатіону. Кінетичні рівняння цих процесів описані у літературних джерелах і базах даних. До моделі був залучений блок реакцій участі гемоглобіну і глутатіону у окисно-відновних цитоплазматичних процесах, описаний раніше (Dotsenko, 2016). Цикл метіоніну відтворювали за даними експериментальних досліджень його ролі в еритроцитах та з використанням відомостей про кінетику цього циклу в гепатоцитах, що є достатньо вивченою.

Остаточна модель включала 90 диференційних рівнянь, що описували динаміку зміни ключових метаболітів та потоків реакцій в еритроцитах. Модель створена у програмі COPASI, моделювання здійснювали з використанням інструментарію COPASI. Адекватність створеної моделі перевіряли шляхом порівняння стаціонарних концентрацій метаболітів моделі з даними літературних джерел.

Отримані розрахунки з використанням моделі дозволяють показати:

- важливість метаболізму метіоніну в еритроцитах, роль S-аденозилметіоніну (SAM) та аденозину у якості альтернативних енергетичних джерел, роль SAM як важливого донору метилу в багатьох реакціях трансметилювання, біологічна функція яких пов'язана з відновленням або деградацією пошкоджених віком білків. Ці процеси набувають особливого значення в умовах окисного стресу та ензимопатій;
- роль нечасто згадуваного маршруту через SAHN як джерела аденіну і аденозину і додаткових можливостей для створення ATP;
- надмірність шляхів порятунку, які використовують SAM і аденозин;
- роль гомоцистеїну у поповненні пулу глутатіону і його залученості у процеси інактивації активних форм кисню при окисному навантаженні на клітину.
- роль співвідношення $[SAM]/[SAH]$ у тонкому регулюванні потоків реакцій метилювання білків, циклу нуклеотидів та глутатіону і передчасного старіння клітин.

**MEDICINAL AND
PHARMACEUTICAL CHEMISTRY /
МЕДИЧНА ТА
ФАРМАЦЕВТИЧНА ХІМІЯ**

ДОСЛІДЖЕННЯ ВІКОВИХ ОСОБЛИВОСТЕЙ ЗМІНИ ЛІПІДНОГО ПРОФІЛЮ КРОВІ У ЖІНОК З ГІПЕРТОНІЄЮ І ШЕМІЧНОЮ ХВОРОБОЮ СЕРЦЯ*Бурдейна І. С., Доценко О. І.*

Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна
burdeina.i@donnu.edu.ua

Серцево-судинні захворювання є основною причиною смертності в Україні. За даними Всесвітньої організації охорони здоров'я серцево-судинні захворювання, такі як гіпертонія, ішемічна хвороба серця – є головною причиною смерті в світі і щорічно забирають мільйони життів. За прогнозами, до 2030 року від цих хвороб помре 23,5 мільйона осіб. За даними УНІАН, серцево-судинні захворювання є основною причиною смертності в Україні. До серцево-судинних захворювань належать – ішемічна хвороба серця (серцеві напади), інсульт, підвищений артеріальний тиск (гіпертонія), захворювання периферичної артерії, ревматична хвороба серця, вроджені захворювання серця і серцева недостатність. Найчастіше причиною таких захворювань є поведінка і звички людини: куріння, брак фізичної активності, неправильне харчування.

Аналіз статистичних даних обстеження мешканців Тростянецького району Вінницької області за першу половину 2019 року показав, що з 184 обстежених осіб віком від 40 до 55 років 15,35 % мали рівень холестерину, що перевищував 5 ммоль/л, 61,7 % – надлишкову вагу, 21,2 % – вперше виявлений підвищений артеріальний тиск. Ми звернули увагу, що серед обстежених жінок, ці показники мали тенденцію до зростання з віком. Так підвищений рівень холестерину був встановлений у 20 % обстежених жінок віком понад 55 років, надлишкова вага – у 75,6 %, підвищений артеріальний тиск – у 40,3 % (для порівняння ці показники у жінок віком до 40 років становили відповідно 7,9, 51,1 та 9,1 %).

У зв'язку зі сказаним, мета роботи полягала у дослідженні особливостей змінення ліпідного профілю крові у жінок різних вікових груп, що страждають на ішемічну хворобу серця та гіпертонію.

В ході виконання роботи було обстежено 48 жінок. Середній вік обстежених пацієнтів склав $58,3 \pm 15,5$ років. Контрольну групу склали жінки в кількості 7 осіб, визнані після проходження медичного огляду практично здоровими. Їх середній вік становив $58,15 \pm 12,1$ років. З обстежених жінок 9 страждали на артеріальну гіпертонію I ступеню, 14 – на артеріальну гіпертонію II ступеню, 10 – на артеріальну гіпертонію III ступеню і 15 осіб – на ІХС.

Кров для біохімічного аналізу брали з вени. Визначення вмісту ліпопротеїдів та холестерину проводили з використанням стандартних методик. На основі даних лабораторних досліджень розраховували індекс атерогенності – основний показник, за яким можна достовірно судити про порушення і зробити прогноз. Експериментальні дані аналізували для груп жінок: віком до 45 років, з 46 до 55 років, 56 до 65 і більше 65 років.

Дослідження показали зниження вмісту ЛПВЩ на 80,8 % у осіб вікової групи з 46 по 55 років порівняно зі здоровими жінками. У інших вікових групах не було виявлено достовірних відмінностей вмісту ЛПВЩ у порівнянні з контролем. Наслідком зниження вмісту ЛПВЩ у жінок цієї групи буде порушення обміну ненасичених жирних кислот і тригліцеридів, розвитку резистентності до інсуліну. Рівень ЛПНЩ і холестерину був достовірно вищий у вікових групах старше 56 років у порівнянні з іншими віковими групами, і в усіх досліджених групах порівняно з контролем.

Проведений аналіз, вказує на залежність формування ліпідного профілю від віку, суттєві відмінності останнього у жінок у період згасання репродуктивної функції. Ці факти потрібно враховувати при профілактиці та лікуванні даних патологій.