



Інститут біоорганічної
хімії та нафтохімії
ім. В.П. Кухаря
НАН України

ЕЗ Хімія

ДВА 2.01. Молекулярні механізми в біоорганічній хімії

Обсяг: 4 кредити ЄКТС

Семестри: IV, Рік: 2026-2027

Дні, Час, Місце: згідно розкладу

Інформація про викладача

Чл.-кор. НАН України, д.х.н., проф. Вовк Андрій Іванович

Контакти

E-mail: yovk@bpci.kiev.ua; моб. тел. (095) 573-00-76

Робоче місце

Відділ механізмів біоорганічних реакцій (к. 208)

Опис курсу

Мета: формування у аспірантів цілісних уявлень про біоорганічні механізми, здобуття базових знань, що стосуються фізико-хімічних основ біохімічних процесів, механізмів біоорганічних реакцій, біоактивності органічних сполук і підходів до конструювання біоактивних сполук.

Завдання:

- формування знань про основи біоорганічної хімії, молекулярні механізми біоорганічних перетворень, будову і функції біологічно активних сполук;
- формування уявлень про закономірності каталізу в ензимології і закономірності дії природних і синтетичних інгібіторів ферментів та інших білкових молекул;
- розуміння принципів створення біологічно активних сполук, вибору потенційних біологічних мішеней для синтетичних гетероциклічних і елементоорганічних молекул;
- застосування комп'ютерних технологій для пошуку і створення біоактивних сполук, спрямованих на потенційні біомішені;
- ознайомлення з експериментальними підходами до оцінки біоактивності, уявлення щодо характеристики біодоступності та аналізу зв'язку між структурою і активністю;
- сприяння розширенню сучасного професійного світогляду, підвищення загальної освіченості та фахової культури хіміка-біоорганіка.

У результаті вивчення навчальної дисципліни аспірант повинен

знати:

- ✓ становлення біоорганічної хімії як науки, механістичні основи перетворень в модельних хімічних і біологічних системах, механізми каталізу в хімії та ензимології, будову і властивості природних і синтетичних біологічно активних сполук, принципи пошуку і створення нових біологічно активних сполук, можливості застосування комп'ютерних технологій для створення біоактивних сполук;
- ✓ фізико-хімічні основи біохімічних процесів, основи моделювання біохімічних процесів, закономірності ліганд-білкових взаємодій ;

- ✓ механістичне підґрунтя перебігу модельних процесів, біоорганічні основи ферментативного каталізу, механізми кислотно-основних стадій, механізми нуклеофільного каталізу, приклади каталізу окремими ферментами;
- ✓ основні положення хімічної кінетики, уявлення про порядок реакції і константи швидкості, особливості практичного застосування кінетичних підходів;
- ✓ основи кінетики ферментативного каталізу, принцип стаціонарності в ферментативній кінетиці, інтерпретацію каталітичних параметрів, приклади механізмів каталізу і кінетичні характеристики деяких ферментів;
- ✓ основи кінетики інгібування ферментативних реакцій, оборотні і необоротні інгібітори, типи інгібувальної здатності, термодинамічні основи процесу інгібування і практичні аспекти вивчення інгібувальної здатності синтетичних сполук;
- ✓ загальну інформацію про терапевтичні мішені і біоактивні сполуки, в тому числі мішені для ліків, ферменти різних класів як терапевтичні мішені, структуру, активність *in vitro* та активність *in vivo* мішень-спрямованих біоактивних молекул і приклади інгібіторів ферментів;
- ✓ результати біоорганічних досліджень окремих гетероциклічних і елементоорганічних сполук з протипухлинною активністю, дослідження антиракової активності синтетичних гетероциклічних і елементоорганічних сполук, лікарських препаратів – інгібіторів протеїнкіназ, механізми інгібування протеїнкіназ і протеїнтирозинфосфатаз,
- ✓ інформацію про різноманіття білкових мішеней для сполук з антираковою активністю і приклади дослідницьких робіт зі створення синтетичних мішень-спрямованих інгібіторів з протипухлинною активністю;
- ✓ принципи пошуку і створення потенційно біоактивних сполук, зв'язок між структурою і активністю органічних сполук, біоізостеризм, використання і формування баз даних, методи комп'ютерного моделювання активності *in silico*, підходи молекулярного докінг, QSAR. параметри ADME;

вміти:

- ✓ добирати інформаційні джерела наукових досліджень, що стосуються вивчення біоактивності органічних сполук і дотичні до області наукових інтересів аспіранта;
- ✓ аналізувати літературні дані у розрізі поставлених синтетичних або інших завдань; використовувати результати кінетичних досліджень для кількісної оцінки активності;
- ✓ обґрунтовувати наукову проблему з урахуванням напрямів можливих досліджень біоактивності синтетичних сполук;
- ✓ розробляти плани наукових досліджень на основі результатів прогнозування біоактивності *in silico*;
- ✓ вирізняти структурні особливості сполук, які визначають її біологічні властивості, оцінювати структури за критеріями формування відповідних баз даних і сполук-лідерів;
- ✓ пропонувати напрями структурної оптимізації структур на основі результатів моделювання біоактивності *in silico* та *in vitro*;
- ✓ застосовувати отримані фундаментальні знання для вирішення наукових і практичних завдань в галузі біоорганічної хімії.

В рамках даної дисципліни поглиблюються і розвиваються такі програмні компетенції:

❖ Інтеграліні компетенції:

Здатність розв'язувати комплексні проблеми в галузі професійної та/або дослідницько-інноваційної діяльності, що передбачає глибоке переосмислення наявних та створення нових цілісних знань та/або професійної практики.

❖ Універсальні компетенції:

ЗК4. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях. Набуття гнучкості мислення, відкритого для застосування набутих хімічних знань для вирішення стратегічних та поточних завдань промислового розвитку, а також для застосування набутих знань у практичних ситуаціях.

❖ **Спеціальні (фахові) компетенції:**

СК1. Глибинні знання зі спеціальності. Знання і розуміння поглибленого рівня в галузі хімії і споріднених областях, включаючи методи проведення експериментів, рівень цих знань повинен бути достатнім для проведення наукових досліджень на рівні останніх світових досягнень і направленим на їх розширення і поглиблення.

СК2. Дослідницькі здатності. Здатність формулювати на сучасному рівні наукову проблему, робочі гіпотези досліджуваної проблеми, виконувати оригінальні дослідження в галузі хімії, досягати наукових результатів, які створюють нові цілісні знання, розв'язувати проблеми та задачі шляхом розуміння їх фундаментальних основ та використання як теоретичних, так і експериментальних методів, засвоєних з освітньо-наукової програми.

СК4. Здатність до критичного аналізу та оцінювання даних. Вміння аналізувати дані проведених експериментів, в тому числі із застосуванням обчислювальної техніки, інтерпретувати результати експериментів та брати участь у дискусіях стосовно наукового та практичного значення отриманих результатів.

Результати навчання дисципліни «Молекулярні механізми в біоорганічній хімії» можна вважати успішними за умови досягнення предметних результатів:

ПРН 15. Знання основних законів хімії, сучасних теорій будови атомів, хімічного зв'язку та будови молекул, закономірностей зміни хімічних властивостей сполук, вміння використовувати основні закони хімії для пояснення властивостей та реакційної здатності біологічно активних сполук, а також процесів за їх участю.

ПРН 19. Знання про місце біоорганічної хімії серед природничих наук, її роль у вирішенні наукових і прикладних проблем, сучасний стан, проблеми і перспективи біоорганічних досліджень. Знання про механізми реакційної здатності природних і синтетичних біомолекул, структуру і біологічні функції вітамінів і коферментів, антибіотиків, пептидів і білків, ліпідів і біологічних мембран, вуглеводів, нуклеїнових кислот.

ПРН 21. Знання принципів конструювання потенційно біоактивних молекул. Знання можливих молекулярних мішеней для синтетичних сполук. Здатність аналізувати зв'язок між структурою та біологічною активністю. Знання методів комп'ютерного моделювання біоактивності органічних сполук, QSAR та молекулярного докінгу. Знання методів використання біополімерів як терапевтично важливих мішеней. Знання про принципи пошуку потенційних біорегуляторів і фармпрепаратів.

Форми і методи навчання

1. Лекції (із застосуванням мультимедійного обладнання). При читанні лекцій викладач орієнтує аспірантів на творче оволодіння матеріалом, дає настанови для наступної самостійної роботи з рекомендованою літературою. На лекції викладається лише узагальнені, вузлові питання навчальної дисципліни, методи й алгоритми розв'язання основних завдань.
2. Семінарські заняття, під час яких проводиться обговорення викладеного матеріалу, надаються рекомендації щодо покращення методики опрацювання та засвоєння нової інформації з дисципліни.
3. Самостійна робота (аудиторна і позааудиторна) передбачає оволодіння аспірантом навчального матеріалу у час, вільний від обов'язкових навчальних занять.

Організація навчання

Розділ дисципліни	Кількість кредитів ЄКТС	Обсяг навчальної роботи, год	Самостійна робота	Вид підсумкового контролю
-------------------	-------------------------	------------------------------	-------------------	---------------------------

		Загал ьни й обся г	Всь ого ауди тор них	Ле кц ії	Пр ак ти чн і	Се мі на рс ьк і		
Тема 1. Предмет біоорганічної хімії. Фізико-хімічні основи біохімічних процесів				2			10	
Тема 2. Хімічні моделі ферментативного каталізу				3		2	10	
Тема 3. Принципи хімічної кінетики				2			10	
Тема 4. Кінетика ферментативного каталізу				3			10	
Тема 5. Інгібування ферментативних реакцій				2		2	10	
Тема 6. Терапевтичні мішені і біоактивні сполуки				3		2	10	
Тема 7. Гетероциклічні і елементоорганічні сполуки з протипухлинною активністю				2			10	
Тема 8. Різноманіття білкових мішеней для сполук з антираковою активністю				3			10	
Тема 9. Принципи пошуку і створення потенційно біоактивних сполук				2		2	10	
РАЗОМ	4	120	30	22		8	90	Екзамен

Політика курсу

Відвідування та / або участь є важливим компонентом курсу. Прослуховування лекцій та приймання участі в обговоренні на семінарських заняттях та семінарах.

Академічна доброчесність та плагіат. Підготовка індивідуальних завдань з використанням інформаційних джерел без посилань на них є плагіатом і несе академічну відповідальність.

Мобільні пристрої на заняттях використовуються тільки з дозволу викладача.

Поведінка в аудиторії, лабораторії. Під час аудиторних занять аспірант додержується правил з техніки безпеки у хімічній лабораторії, навчальній аудиторії, комп'ютерному класі.