

Анотація навчальної дисципліни «Молекулярні механізми в біоорганічній хімії»

Анотація. Дисципліна «Молекулярні механізми в біоорганічній хімії» належить до переліку вибірових навчальних дисциплін, що пропонуються в рамках циклу професійної підготовки аспірантів зі спеціальності «Хімія» на другому році навчання. Вона забезпечує загальний та професійний розвиток аспіранта і спрямована на отримання поглиблених знань з біоорганічної хімії, що стосуються механізмів біоорганічних процесів за участю природних і синтетичних біологічно активних сполук в модельних хімічних і біологічних системах. Аспіранти вивчатимуть фізико-хімічні основи і загальні механізми хімічних перетворень біоактивних сполук та механізми ферментативних реакцій. Буде подано матеріал про будову, властивості і біологічні функції природних сполук, в тому числі вітамінів і коферментів, механізми ферментативного каталізу та механізми інгібування, практичну кінетику і термодинаміку модельних процесів. Аспіранти отримають інформацію щодо структури і функцій деяких ферментів і білків як потенційних біомішеней та їх комплексів з синтетичними низькомолекулярними лігандами і набудуть знань, які стосуються створення нових лікарських засобів. Курс включатиме розгляд методів моделювання біоактивності органічних сполук *in vitro* та *in silico*, в тому числі комп'ютерних підходів до передбачення біоактивності, застосування молекулярного докінгу і QSAR.

Кількість кредитів: 4

Викладач: Вовк Андрій Іванович, д. х. н., професор, директор Інституту біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України, член-кореспондент НАН України.

Мова викладання: українська.

Місце у структурно-логічній схемі: ДВА 2.01 читається на другому році навчання.

Термін вивчення: дисципліна вивчається на другому році навчання за освітньо-науковим рівнем «доктор філософії» в обсязі 120 годин, у тому числі 30 годин аудиторних занять (22 год. – лекційні заняття, 8 годин – семінари), 90 годин самостійної роботи.

Метою навчальної дисципліни є формування у аспірантів цілісних уявлень про предмет біоорганічної хімії, що включатиме знання молекулярних механізмів біоорганічних перетворень, будови, властивостей і функцій біологічно активних сполук, фізико-хімічних основ біоактивності, закономірностей каталізу і комплексоутворення в ензимології, принципів створення біологічно активних сполук, вибору потенційних біологічних мішеней для синтетичних структур, застосування комп'ютерних технологій для пошуку біоактивних сполук. Матеріал курсу є необхідним для аналізу

наукової інформації з предмету біоорганічної хімії в процесі підготовки дисертаційної роботи та наукових публікацій. Оволодіння програмою курсу сприятиме вирішенню завдань дисертаційного дослідження та застосування його результатів.

Змістовні модулі дисципліни:

- Кінетика і молекулярні механізми біоорганічних реакцій природних і синтетичних сполук в модельних хімічних і біологічних системах;
- Біомішені, субстрати, інгібітори, залежність «структура – активність»;
- Моделювання біоактивності *in vitro* та *in silico*.

В результаті вивчення курсу аспірант повинен знати:

- механізми біоорганічних процесів в модельних хімічних і біологічних системах;
- кінетичні закономірності і механізми каталізу в хімії та ензимології;
- будову і властивості природних і синтетичних біологічно активних сполук;
- принципи пошуку і створення нових біологічно активних сполук;
- можливості використання потенційних біомішеней для пошуку нових біоактивних речовин;
- можливості застосування комп'ютерних технологій для створення біоактивних сполук.

В результаті вивчення курсу аспірант повинен вміти:

- обґрунтовувати наукову проблему і актуальність дослідження механізмів модельних біоорганічних процесів;
- використовувати інформаційні джерела, фізико-хімічні методи для планування і дослідження біоактивності;
- використовувати отримані знання для прогнозування біоактивності, аналізувати і оформляти результати робіт;
- користуватись програмним забезпеченням для аналізу комп'ютерних розрахунків;
- застосовувати отримані фундаментальні знання для вирішення наукових і практичних завдань в галузі біоорганічної хімії.