

Відділ комбінаторної хімії біологічно активних речовин

В. о. завідувача відділу — кандидат хімічних наук,
старший науковий співробітник С. М. Ярмолюк

E-mail: sergiy@yarmoluk.org.ua

web-sites: www.yarmoluk.org.ua; www.biochemweb.org.ua; www.bioorganica.org.ua

Відділ комбінаторної хімії біологічно активних речовин створено у 2003 році на основі групи хімії нуклеїнових кислот відділу структури і функцій нуклеїнових кислот Інституту молекулярної біології і генетики НАН України. Наукові дослідження відділу проводяться в галузі біоорганічної та комбінаторної хімії для потреб молекулярної біології і медицини.

Група дизайну флуоресцентних барвників розробляє нові флуоресцентні зонди для застосування в діагностичних системах. Вперше запропоновано оригінальний підхід до створення флуоресцентних зондів із заданими властивостями, так званий метод «провідного барвника» (lead dye). Розроблений метод успішно апробований у контрактних дослідженнях, які здійснюються групою на замовлення низки компаній, зокрема, «Fluka» (Чехія) і «Chromleon GmbH» (Німеччина).

Дослідження для розробки нових зручних методів мічення олігонуклеотидів та білків поліметиновими барвниками є одним з важливих наукових напрямків роботи групи. Нещодавно одержано європейський патент на новий ефективний метод мічення біомолекул, що ґрунтується на використанні пірилієвих солей як аміноспецифічних реакційних груп. Створена методика досить проста і зручна для практичного використання і є альтернативою відомим методам.

Вивчаються також механізми взаємодії ціанідів з двоспіральною ДНК та білками. Вперше запропоновано напівінтеркаляційну модель взає-

модії асиметричних монометинціанінових барвників з ДНК, що відкриває широкі можливості для створення принципово нових флуоресцентних зондів для нуклеїнових кислот.

Група хімії інгібіторів протеїнкіназ здійснює направлений пошук потенційних інгібіторів СК2 кінази як протиракових ліків на основі синтезу комбінаторних бібліотек хімічних сполук. Протиракова активність одержаних сполук вивчається в Американському інституті раку згідно з угодою про співробітництво.

Група молекулярного дизайну працює над дизайном in silico інгібіторів протеїнкіназ. Розроблено комбіновану систему віртуального скринінгу лігандів, яка поєднує у собі послідовні етапи молекулярної динаміки та гнучкого докінгу, що дозволяє поліпшити передбачення біологічної активності.

*Вперше на теренах СНД співробітниками відділу створено вебпортал www.biochemweb.org.ua та віртуальний науковий журнал *Ucrainica Bioorganica Acta* (www.Bioorganica.org.ua) для спеціалістів у галузі біоорганічної хімії.*

Відділ активно співпрацює з вітчизняними і зарубіжними науковими установами. Він, зокрема, є координатором Української наукової мережі зі створення протиракових препаратів (УАМ) на основі сучасних методів комп'ютерного моделювання, комбінаторної хімії та біологічного тестування.