

М. А. Тукало

Ярмолук Сергій Миколайович



ЯРМОЛЮК Сергій Миколайович (02. 02. 1957, с. Пустоха Ружинського р-ну Житомирської обл., нині Прибережне Бердичівського р-ну Житомирської обл.) — фахівець у галузі медичної хімії. Доктор хімічних наук (2005), професор (2006). Державна премія АР Крим (2012). Винахідник року НАНУ (2020). Закінчив Київський університет (1979). Відтоді працює в Інституті молекулярної біології і генетики НАНУ (Київ): від 2003 — завідувач відділу біомедичної хімії. Основний напрям наукових досліджень — раціональний дизайн інгібіторів ензимів як потенційних лікарських засобів за допомогою методів комп'ютерного моделювання, біохімічного скринінгу та органічного синтезу. За участі Я. розроблено нові методи синтезу біологічно активних молекул з метою покращення їх активності, селективності та ADME-властивостей, а також нові сполуки з антимікробною активністю щодо резистентних штамів мікроорганізмів із використанням методів рецепторно-орієнтованого (молекулярний докінг) і ліганд-орієнтованого (байсове та фармакофорне моделювання) скринінгу. Проведено пошук нових мішеней і підходів для розробки антибактеріальних сполук.

Основні праці

Dual-targeted hit identification using pharmacophore screening // *J. of Computer-Aided Molecular Design*. 2019. Vol. 33; Rational design of hit compounds targeting *Staphylococcus aureus* threonyl-tRNA synthetase // *ACS Omega*. 2021. Vol. 6, № 38; Identification of novel antistaphylococcal hit compounds targeting sortase A // *Molecules*. 2021. Vol. 26, № 23; Identification of dual-targeted *Mycobacterium tuberculosis* aminoacyl-tRNA synthetase

inhibitors using machine learning // Future Medicinal Chemistry. 2022. Vol. 14, № 17; Identification of novel small-molecular inhibitors of Staphylococcus aureus sortase A using hybrid virtual screening // J. of Antibiotics. 2022. Vol. 75, № 6; Probing interactions of aminoacyl-adenylate with Mycobacterium tuberculosis methionyl-tRNA synthetase through in silico site-directed mutagenesis and free energy calculation // J. of Biomolecular Structure and Dynamics. 2023. Vol. 41, № 13 (усі — співавт.).

Бібліографічний опис:

Ярмолук Сергій Миколайович / М. А. Тукало // Енциклопедія Сучасної України [Електронний ресурс] / Редкол.: І. М. Дзюба, А. І. Жуковський, М. Г. Железняк [та ін.]; НАН України, НТШ. – К. : Інститут енциклопедичних досліджень НАН України, 2024. – Режим доступу: <https://esu.com.ua/article-882104>

2001-2025 © Ця енциклопедична стаття захищена авторським правом згідно з чинним законодавством України ([докладніше](#)).