

III WARSZTATY POL-OPENSREEN

KRAJOWA BIBLIOTEKA ZWIĄZKÓW CHEMICZNYCH

Otwarty dostęp do innowacyjnych rozwiązań w poszukiwaniu
związków biologicznie aktywnych



Łódź, 9 i 10 maja 2023 r.

Infrastruktura Krajowej Biblioteki Związków Chemicznych (KBZCh) POL-OPENSREEN (www.pol-openscreen.pl), po uruchomieniu jej ponad rok temu i po okresie rozruchu, funkcjonuje zgodnie z przeznaczeniem. KBZCh przyjmuje związki chemiczne, syntetyzowane w krajowych laboratoriach (uczelnie, instytuty, laboratoria badawcze, inne) na potrzeby różnych projektów badawczych i umożliwia ich „repurposing” poprzez udostępnianie zainteresowanym podmiotom zarówno polskim jak i zagranicznym do biologicznych badań skринingowych w celu poszukiwania nowych związków bioaktywnych oraz innych badań naukowych. Związki są przyjmowane i udostępniane na zasadach zabezpieczających własność intelektualną zainteresowanych stron.

Projekt jest finansowany przez MEiN, znajduje się na Polskiej Mapie Drogowej Infrastruktury Badawczej i jest częścią europejskiego konsorcjum EU-OPENSREEN (www.eu-openscreen.eu).

Kontynuujemy również organizowanie Warsztatów KBZCh. Po I Warsztatach, które odbyły się w czerwcu i II Warsztatach które odbyły się w listopadzie 2022 roku, mamy przyjemność gościć Państwa podczas trzeciej edycji tych spotkań. Już ponad dziesięć wiodących instytutów badawczych i uczelni podjęło współpracę z KBZCh, kolejne planują dołączenie w nieodległej przyszłości.

Interdyscyplinarne badania w obszarze chemii, biologii, farmakologii, metod obliczeniowych mające na celu poszukiwania i identyfikację związków biologicznie aktywnych choć są fascynującą, intelektualną przygodą nie są prowadzone same dla siebie. W tym roku do grona prezentujących dołączają przedstawiciele, wiodących, polskich firm biotechnologicznych aktywnych w obszarze „drug discovery”. Mam nadzieję, że w przyszłości stanie się to tradycją naszych spotkań przyczyniając się do pogłębiania współpracy między nauką akademicką i branżą farmaceutyczną w Polsce. Będzie też sprzyjać tworzeniu platformy współpracy i integracji społeczności zarówno chemików jak i biologów, zainteresowanych poszukiwaniem i badaniami związków bioaktywnych przydatnych w różnych dziedzinach życia jako nowe farmaceutyki, środki ochrony roślin, związki do produkcji żywności, składniki kosmetyczne i inne. Zapraszamy do KBZCh

Zbigniew J. Leśnikowski
Koordynator POL-OPENSREEN

ORGANIZACJA

prof. dr hab. Zbigniew J. LEŚNIKOWSKI

kierownik KBZCh i koordynator POL-OPENSOURCE

**Instytut Biologii Medycznej PAN, Pracownia Chemii Medycznej, Krajowa Biblioteka
Związków Chemicznych**

e-mail: zlesnikowski@cbm.pan.pl; zlesnikowski@pol-openscreen.pl

mgr inż. Agata KRAJ

menedżer biblioteki związków

Instytut Biologii Medycznej PAN, Krajowa Biblioteka Związków Chemicznych

e-mail: akraj@pol-openscreen.pl

inż. Dorota BOROWIECKA

administrator baz danych

Instytut Biologii Medycznej PAN, Krajowa Biblioteka Związków Chemicznych

e-mail: dborowiecka@pol-openscreen.pl

PROGRAM

Wtorek, 9 maja 2023 r.

10:00-10:10	Wprowadzenie Zbigniew J. LEŚNIKOWSKI Instytut Biologii Medycznej PAN
10:10-10:55	Cracking the Code of Drug Discovery: Machine Learning in Library Design Szymon CZAPLAK Selvita S.A. - Hexagon Machine Learning Specialist Computational Chemistry
10:55-11:25	Krajowa Biblioteka Związków Chemicznych (KBZCh) – infrastruktura. Zbigniew J. LEŚNIKOWSKI Instytut Biologii Medycznej PAN Pracownia Chemii Medycznej Krajowa Biblioteka Związków Chemicznych
11:25-11:55	Receptory H3 histaminowe - atrakcyjny cel w poszukiwaniu skutecznych terapii w chorobach ośrodkowego układu nerwowego Dorota ŁAŻEWSKA Uniwersytet Jagielloński-Collegium Medicum Wydział Farmacji
11:55-12:05	<i>Przerwa kawowa</i>
12:05-12:50	Selekcja i rozwój innowacyjnych cząsteczek. Case study Damian SMUGA Celon Pharma Ltd Lider Zespołu Analiz Fizykochemicznych

- 12:50-13:20 **Benzosiloksaborole: synteza, charakterystyka i zastosowania w chemii medycznej**
- Sergiusz LULIŃSKI**
Politechnika Warszawska
Wydział Chemiczny
Katedra Chemii Fizycznej
- 13:20-14:10 **Wpływ podstawienia-alkilowania układu dilaktamowego w analogach antramycyny na efekt cytotoksyczny i selektywność działania**
- Adam MIECZKOWSKI**
Instytut Biochemii i Biofizyki PAN
Pracownia Chemii Biologicznej Jonów Metali
- 14:10-14:40 **Trypletowe fotoczułaczce boroorganiczne w zastosowaniach medycznych**
- Krzysztof DURKA**
Politechnika Warszawska
Wydział Chemiczny
Katedra Chemii Fizycznej
- 14:40-16:00 **Lunch**
- 16:00-18:30 **Wizyta w Krajowej Bibliotece Związków Chemicznych**

Środa 10 maja 2023 r.

- 10:00-10:45 **Proces rozwoju leku w Molecure S.A. – od celu molekularnego do badań klinicznych**
- Jacek OLCZAK**
Dyrektor chemii medycznej
Molecure S.A.
- 10:45-11:15 **Charakterystyka tRNA nukleotydylotransferazy jako potencjalnej tarczy molekularnej dla nowych leków przeciwpłatkowych.**
- Jarosław DZIADEK**
Instytut Biologii Medycznej PAN
Pracownia Genetyki i Fizjologii Mycobacterium
- 11:15-12:45 **Metalokarborany jako modyfikatory nukleozydów adeniny: nowe podejście do chemiodporności komórek rakowych**
- Katarzyna BEDNARSKA-SZCZEPANIAK**
Instytut Biologii Medycznej PAN
Pracownia Chemii Medycznej

12:45-13:15

Podwójne działanie 5-HT₆R/CDK5 jako strategia w poszukiwaniu skutecznej terapii zaburzeń poznawczych w chorobie Alzheimera

Sylwia SUDOŁ-TAŁAJ

Uniwersytet Jagielloński-Collegium Medicum
Wydział Farmacji

13:15-13:45

Synteza i badania wybranych właściwości 3-podstawionych benzoksaboroli

Patrycja LUDERA

Politechnika Warszawska
Wydział Chemiczny
Katedra Chemii Fizycznej

13:45-14:00

Dyskusja i podsumowanie

14:00-

Lunch

Lista uczestników i partnerów KBZCh

dr hab. inż. Agnieszka ADAMCZYK-WOŹNIAK, prof.

Politechnika Warszawska

Wydział Chemiczny

Katedra Chemii Fizycznej

ul. Noakowskiego 3

00-664 Warszawa.

E-mail: agnieszka@ch.pw.edu.pl

dr Katarzyna BEDNARSKA-SZCZEPANIAK

Instytut Biologii Medycznej PAN

Pracownia Chemii Medycznej

ul. Lodowa 106

93-232 Łódź

E-mail: kabed@cbm.pan.pl

mgr Szymon CZAPLAK

Selvita S.A. - Hexagon

ul. Podole 79

30-394 Kraków

E-mail: szymon.czaplak@selvita.com

dr Krzysztof DURKA

Politechnika Warszawska

Wydział Chemiczny

Katedra Chemii Fizycznej

ul. Noakowskiego 3

00-664 Warszawa

E-mail: krzysztof.durka@pw.edu.pl

prof. dr hab. Jarosław DZIADEK

Instytut Biologii Medycznej PAN

Pracownia Genetyki i Fizjologii Mycobacterium

ul. Lodowa 106

93-232 Łódź

E-mail: jdziadek@cbm.pan.pl

prof. dr hab. inż. Beata KOLESIŃSKA
Kierownik Zespołu Chemii i Inżynierii Peptydów i Białek
Politechnika Łódzka
Wydział Chemii
Instytut Chemii Organicznej
E-mail: beata.kolesinska@p.lodz.pl

prof. dr hab. Zbigniew J. LEŚNIKOWSKI
Instytut Biologii Medycznej PAN
Pracownia Chemii Medycznej
ul. Lodowa 106
93-232 Łódź
E-mail: zlesnikowski@cbm.pan.pl

inż. Patrycja LUDERA
Politechnika Warszawska
Wydział Chemiczny
Katedra Chemii Fizycznej
ul. Noakowskiego 3
00-664 Warszawa.
E-mail: patrycja.ludera.stud@pw.edu.pl

prof. dr hab. Sergiusz LULIŃSKI
Politechnika Warszawska
Wydział Chemiczny
Katedra Chemii Fizycznej
ul. Noakowskiego 3
00-664 Warszawa.
E-mail: sergiusz.lulinski@pw.edu.pl

dr hab. Dorota ŁAŻEWSKA
Uniwersytet Jagielloński-Collegium Medicum
Wydział Farmaceutyczny
Katedra Technologii i Biotechnologii Środków Leczniczych
ul. Medyczna 9
30-688 Kraków
E-mail: dorota.lazewska@uj.edu.pl

dr hab. Adam MIECZKOWSKI
Instytut Biochemii i Biofizyki PAN
Pracownia Chemii Biologicznej Jonów Metali
ul. A. Pawińskiego 5a
02-106 Warszawa
E-mail: amiecz@ibb.waw.pl

inż. Aleksandra NOWACKA
Politechnika Warszawska
Wydział Chemiczny
Katedra Chemii Fizycznej
ul. Noakowskiego 3
00-664 Warszawa.
E-mail: aleksandra.nowacka2.stud@pw.edu.pl

dr Jacek OLCZAK
Molecure S.A.
ul. Żwirki i Wigury 101
02-089 Warszawa
E-mail: j.olczak@molecure.com

dr hab. Agnieszka OLEJNICZAK, prof.
Instytut Biologii Medycznej PAN
Laboratorium Skriningowe
ul. Lodowa 106
93-232 Łódź
E-mail: aolejniczak@cbm.pan.pl

Wojciech PIETRUS
Bioinformatyk
Celon Pharma Ltd
ul. Ogrodowa 2a
05-092 Łomianki/Kielpin
E-mail: wojciech.pietrus@celonpharma.com

dr Damian SMUGA
Team Leader - Laboratory of Physicochemical Analysis
Celon Pharma Ltd
ul. Ogrodowa 2a
05-092 Łomianki/Kielpin
E-mail: damian.smuga@celonpharma.com

mgr inż. Sylwia SUDOŁ-TAŁAJ
Uniwersytet Jagielloński-Collegium Medicum
Wydział Farmaceutyczny
Katedra Technologii i Biotechnologii Środków Leczniczych
ul. Medyczna 9
30-688 Kraków
E-mail: s.sudol@doctoral.uj.edu.pl

prof. dr hab. Lucyna WOŹNIAK
Uniwersytet Medyczny w Łodzi
Zakład Biologii Strukturalnej
Al. Kościuszki
90-419 Łódź
E-mail: lucyna.wozniak@umed.lodz.pl

