

**ՀՀ ԳԱԱ մոլեկուլային կենսաբանության ինստիտուտի**

**2024 թվականի հաշվետվություն**

## **1. Կարևորագույն արդյունքները**

Հայկական պոպուլյացիայի ժամանակակից և տարածաշրջանի հնագույն ԴՆԹ նմուշների ամբողջական գենոմի առաջին հետազոտությամբ հերքվել է հայերի ծագման Բալկանյան տեսությունը: Հետազոտության արդյունքները բացառում են նաև սասունցիների ասորական ծագումը, ինչպես և ցույց են տալիս, որ այս բարձրալեռնային շրջանի բնակչությունը, ի տարբերություն հայերի այլ աշխարհագրական խմբերի, ոչ վաղ անցյալում զգալի կրճատվել է: Հայկական լեռնաշխարհի բնակչության գենետիկական շարունակականության վարկածի ստուգումը պարզել է, որ հայերի գենոֆոնդի վրա նկատելի ազդեցություն են ունեցել Լևանտի նեոլիթյան երկրագործները: Հայկական լեռնաշխարհի արևելյան, արևմտյան և կենտրոնական շրջանների պոպուլյացիաները գենետիկորեն շատ մոտ են՝ մատնանշելով հայերի աշխարհագրորեն տարբեր խմբերի ընդհանուր ժողովրդագրական պատմությունը (դեկ.՝ կ.գ.դ. Լ.Եպիսկոպոսյան):

## 2. Բազային ֆինանսավորմամբ ստացված արդյունքները

Երկարատև հիպերգլիկեմիան խախտում է M1 և M2 մակրոֆագերին բնորոշ ֆունկցիոնալ դիստոմիան, ինչը կարող է բացատրել հյուսվածքային մակրոֆագերի խառը բնեռացումը քրոնիկ հիպերգլիկեմիայի հետ կապված մետաբոլիկ համախտանիշի ժամանակ: Օստեոարթրիտով հիվանդների մոտ առաջին անգամ բնութագրվել է սինովիալ հեղուկի բջջային կազմը՝ բացահայտելով միելոիդ դենդրիտային բջիջների գերակշռությունը: Ջանգվածային միելոիդ դենդրիտային բջիջների առկայությունը սերտորեն ասոցացվում է հոդերի ավելի մեղմ վնասման և հիվանդության վաղ փուլի հետ (ղեկ.՝ կ.գ.թ. Գ.Մանուկյան):

2023 և 2024 թթ. անջատված *Klebsiella pneumoniae* կլինիկական իզոլյատներում հայտնաբերվել են բազմադեղակայուն (ԲԴԿ) շտամներ, որոնք բնութագրվել են ամբողջական գենոմի վերլուծության հիման վրա: Առաջին անգամ Հայաստանում հայտնաբերվել են նոր բարձր ռիսկային ԲԴԿ *K. pneumoniae* ST39 կլոնին պատկանող շտամներ, որոնք գենետիկորեն մոտ են (99.98%) Եթովպիայում 2020 թ-ին անջատված շտամներին: Բացահայտվել է, որ Հայաստանում շրջանառվող բարձր ռիսկային ԲԴԿ ST395 կլինիկական շտամները առավելագույն նմանություն են ցուցաբերում Ռուսաստանում և Գերմանիայում անջատված շտամների հետ (99.96-99.98%), իսկ ST307-ին պատկանող կլինիկական շտամները՝ ԱՄՆ-ում շրջանառվող շտամների հետ (99.97-99.98%): Այս շտամները համալրել են ինստիտուտում պահպանվող՝ առավել տարածված բակտերիալ վարակների հարուցիչների կլինիկական իզոլյատների հավաքածուն (ղեկ.՝ կ.գ.թ. Ա.Մեդրակյան):

Ֆարմակոֆոր մոդելների կառուցման, վիրտուալ սքրինինգի և արհեստական բանականության մեթոդների օգտագործմամբ հայտնաբերվել են քիմիական նոր կառուցվածքներ, որոնք ճնշում են SARS-CoV-2-ի Mpro ֆերմենտի ակտիվությունը: Հայտնաբերվել են բջջային միրիստոիլացիայի արգելակիչ IMP1088-ի հակավիրուսային ազդեցությունը խոզերի աֆրիկյան ժանտախտի վիրուսի և 1-ին տիպի հասարակ հերպես վիրուսի վրա (ղեկ.՝ կ.գ.թ. Հ.Զաքարյան):

Նիպահ վիրուսի W և մարդու 14-3-3 սպիտակուցային համալիրի համար մոդելավորվել են 1000 կառուցվածքներ և ընտրվել են 9 լավագույնները հետագա աշխատանքի համար: ZINC, Chem Space, ChEMBL, iPPI-DB, Enamin, PubChem քիմիական միացությունների շտեմարաններից ստեղծվել է 500000 միացությունից բաղկացած գրադարան՝ որպես սպիտակուց-սպիտակուցային փոխազդեցության հնարավոր մոդուլատորներ, որոնք համապատասխանում են դեղաբանորեն ակտիվ միացությունների չափանիշներին (ղեկ.՝ կ.գ.դ. Կ.Նազարյան):

Եղեգիս քարանձավում (Վայոց Ձորի մարզ) պեղումների ժամանակ հայտնաբերվել է 8490 ոսկրային մնացորդ, որոնցից 604-ը ենթարկվել է մոլեկուլային նույնականացման ZooMS մեթոդով: Հայտնաբերվել է 13 կենդանատեսակ: Բրածո ոսկրերի ձևաբանական և մոլեկուլային նույնականացման արդյունքները ցույց են տալիս, որ Եղեգիս-1 քարայրի բոլոր շերտերում կենսաբազմազանության կառուցվածքը պահպանվում է, ինչը հաստատում է, որ էնեոլիթյան համայնքների ապրելակերպում նկատելի փոփոխություններ տեղի չեն ունեցել (ղեկ.՝ կ.գ.դ. Լ.Եպիսկոպոսյան):

Ցույց է տրվել, որ արյան քաղցկեղային բջիջներում սուբլետալ (50% կենսունակություն) ԴՆԹ-ի վնասվածքների ինդուկցումը խթանում է *Ref-1* գենով կոդավորվող APEX1 սպիտակուցի էքսպրեսիան: Այս գենի լոեցումը RNAi տեխնոլոգիայով զգալիորեն վերականգնում է քաղցկեղային բջիջների զգայունությունը՝ հանգեցնելով 80%-ի մահվան (64%-ը՝ ապոպտոտիկ մեխանիզմով)՝ միաժամանակ թույլ ազդեցություն ունենալով առողջ

բջիջների վրա (49% կենսունակություն): Այսպիսով, *Ref-1* գենը խոստումնալից թիրախ է սինթետիկ լետալության համար (ղեկ.՝ կ.գ.թ. Ն.Բաբայան):

Մշակվել են կրծքագեղձի քաղցկեղի և գլխուղեղի գլիոբլաստոմայի եռաչափ բջջային մոդելներ, բնութագրվել է մոդելների աճման դինամիկան երկարաժամկետ կուլտիվացիայի (մինչև 30 օր) պայմաններում: Հետազոտվել է 5-ֆտորուրացիլի ածանցյալների (տրամադրվել են ՀՀ ԳԱԱ օրգանական և դեղագործական քիմիայի գիտատեխնոլոգիական կենտրոնի կողմից) հակաքաղցկեղային ակտիվությունը՝ կիրառելով մարդու թոքերի քաղցկեղային և նորմալ բջիջներ: Դրանցից երկուսը (C1 և C4) ցուցաբերել են հակաքաղցկեղային ակտիվության ավելի բարձր մակարդակ՝ համեմատած 5-FU-ի հետ, իսկ C6 և C7 ածանցյալները ցուցաբերել են ազատ ռադիկալների առաջացման բարձր ակտիվություն՝ հանդիսանալով պոտենցիալ ռադիոսենսիբիլիզատորներ (ղեկ.՝ կ.գ.թ. Ն.Բաբայան):

Օգտագործելով KCNQ1/KCNE3 կրիոէլեկտրոնային կառուցվածքը՝ մոլեկուլային դինամիկայի (ՄԴ) սիմուլյացիաների կիրառմամբ բացահայտվել է, որ կալիումի իոնների ներթափանցումը հնարավոր է դառնում դրանց մասնակի ջրազրկման պայմաններում: ՄԴ սիմուլյացիաների, մուտացիոն սբրինինգի և մեկ ալիքի գրանցման միջոցով բացահայտվել է, որ, խոռոչի նեղ հատվածի G345 մուտացիաները կարող են խափանել իոնների հոսքը (ղեկ.՝ կ.գ.թ. Վ.Վարդանյան):

Նկարագրվել է խոզերի աֆրիկյան ժանտախտի վիրուսի (ԽԱԺՎ) նոր տարբերակով (Dilijan2011IMB, Կովսական շտամ) պայմանավորված հիվանդության ընթացքը՝ որը ունի քրոնիկ, իսկ որոշ դեպքերում անախտանիշ բնույթ: Բնութագրվել են հիվանդության նոր՝ քրոնիկացված ձևերի զարգացման կլինիկական, պաթոլոգիական, իմունաբանական, վիրուսաբանական և գենետիկական պարամետրերի առանձնահատկությունները, ըստ որոնց՝ ԽԱԺՎ-ի քրոնիկացումը կարող է պայմանավորված լինել ավելի թույլ արտահայտված իմունային պատասխանով, ինչպես նաև վարակված խոզերի արյան և հյուսվածքների վիրուսի տիտրերի նվազմամբ: Իմունային պատասխանի շրջանցման համար պատասխանատու վիրուսի բազմազեն ընտանիքի որոշ գեների (multigen family genes) մասնակի սեքվենավորումը բացահայտել է մուտացիաների առկայություն, ինչը կարող է պայմանավորել հիվանդության նոր դրսևորումը (ղեկ.՝ կ.գ.դ. Զ.Կարալյան):

Իրականացվել է Տավուշի մարզի հին և լքված խաղողի այգիների գույքագրում, հավաքագրվել են շուրջ 170 տարբեր գենոտիպեր, որոնց համար ստեղծվել են առաջնային անձնագրային տվյալներ, ապա սորտերը ենթարկվել են ֆրագմենտային սեքվենավորման՝ նույնականացման նպատակով: Ստացված գենետիկական տվյալները այժմ գտնվում են վերլուծության փուլում՝ ճշգրտելու սորտերի, կլոնների կամ մուտանտ ձևերի քանակը, որից հետո նոր սորտերը կհամալրեն ինչպես ՀՀ, այնպես էլ միջազգային տվյալների բազան (ղեկ.՝ կ.գ.թ. Ք.Մարգարյան):

«AMADEE-24» Մարսի անալոգային հետազոտության շրջանակում ցույց է տրվել, որ մեկուսացման առաջին օրերին տեղի է ունենում արյան լեյկոցիտների քրոմոսոմների թելոմերների երկարության կտրուկ նվազում, որը սակայն վերականգնվում է ժամանակի ընթացքում: Այսպիսով, մեկուսացումը կարող է հանգեցնել իմունային համակարգի ակտիվության ժամանակավոր նվազման, իսկ իմունային համակարգի մոդուլացնող միջամտությունները վաղ փուլերում կարող են նվազեցնել հնարավոր առողջական ռիսկերը (ղեկ.՝ կ.գ.դ. Ա.Առաքելյան):

### 3. Թեմատիկ ֆինանսավորմամբ ստացված արդյունքները

Հակաֆոսֆոլիպիդային համախտանիշի (ՀՖՀ) մկների մոդելի կիրառմամբ ստացված տվյալները ցույց են տվել, որ հակաֆոսֆոլիպիդային հակամարմինները նշանակալի դեր են խաղում ընկերքի մի շարք ախտաբանական փոփոխությունների մեջ: Ընկերքի մորֆոլոգիայի ու տրանսկրիպտոմային պրոֆիլի դիտարկված փոփոխությունները ենթադրում են կապ ՀՖՀ-ի ժամանակ հղիության խաթարումների և պրեէկլամպսիայի զարգացման հիմքում ընկած մեխանիզմների միջև: Ընկերքի ախտաբանական փոփոխությունները հավանաբար առաջանում են իմունային տոլերանտության խախտման և անոթազոյացման խանգարումների հետևանքով (ղեկ.՝ կ.գ.թ. Գ.Մանուկյան):

Իրականացվել են 2, 3 և 4 մկրվրկ մոլեկուլային դինամիկայի սիմուլյացիաներ 14-3-3/պիրին, 14-3-3/N և 14-3-3/p53 համալիրների համար: Ստացված հետազոտվել են կապման կայքերի միջև հեռավորությունը որոշելու, RMSD արժեքների վերլուծության, ազատ կապման էներգիայի (MM-(PB/GB)-SA) հաշվարկի, X-ray կառուցվածքների հետ (14-3-3 և թիրախային սպիտակուցի պեպտիդ) հետազոտվել են համեմատման համար: Հետազոտվել է 14-3-3 սպիտակուցի դերը չկարգավորված կառուցվածք ունեցող սպիտակուցների հավաքման գործընթացում (ղեկ.՝ կ.գ.դ. Կ.Նազարյան):

Նանոպորային սեքվենավորման և մեքենայական ուսուցման հիման վրա մշակվել է քրոնիկ լիմֆոցիտար լեյկեմիայի տրանսկրիպտոմային ենթատիպերի բացահայտման և հիվանդության ընթացքի կանխագուշակման մեթոդ (ղեկ.՝ կ.գ.դ. Ա.Առաքելյան):

Առնետների գլխուղեղի պարաֆինացված նմուշների տարբեր օրերի սինքրոտրոնային ռենտգենյան ճառագայթահարման ուսումնասիրությունը ցույց է տվել, որ գերկարճ իմպուլսներով էլեկտրոնային փնջերով ճառագայթումը կենդանիների մոտ հրահրում է գլխուղեղում նյարդային կառույցների և ուղեղանոթային համակարգի խաթարումներ (ղեկ.՝ կ.գ.թ. Է.Առաքելովա):

Ցրված սկլերոզի փորձնական մոդելի վրա ցույց է տրվել հարբորբոքային ցիտոկինների կարևոր դերը ալերգիկ աուտոիմունային էնցեֆալոմիելիտի պաթոգենեզում, որը դրսևորվել է սֆինգոմիելինային ցիկլի խթանմամբ և նյարդային բջիջներում ապոպտոտիկ գործընթացների ակտիվացմամբ: Գանգլիոզիդներ պարունակող դեղամիջոցի ընդունումը հանգեցրել է ուսումնասիրված պարամետրերի մակարդակների նորմալացման, ինչը ցույց է տալիս վերջինիս պոտենցիալ նեյրոպաշտպանիչ ազդեցությունը (ղեկ.՝ կ.գ.թ. Գ.Ղազարյան):

ՀՀ խաղողի ազգային կոլեկցիոն այգում ավարտվել է խաղողի տնտեսական կարևորություն ունեցող վիրուսների մոլեկուլային նույնականացումը և բնութագրումը: Քարտեզագրվել են ՀՀ խաղողի կոլեկցիոն այգու և խաղողագործական տարբեր շրջանների այգիները, որտեղ դիտարկվել են GLRaV-1, GLRaV-3, GFLV, GVA, GVB, GFkV վիրուսները (ղեկ.՝ կ.գ.թ. Ք.Մարգարյան):

Իրականացվել է շրջակա միջավայրի ծանր մետաղների երկարատև ազդեցության հետևանքների գնահատում Հայաստանի հանքարդյունաբերական շրջանների բնակչության շրջանում: Նկարագրվել են քիմիական տարրերի ռեֆերենտ կոնցենտրացիաները հայկական պոպուլյացիայում, որոշվել են օնկոգենների և իմունային պատասխանի գենների փոփոխությունները մետաղների երկարատև ազդեցության հետևանքով, կատարվել է գենաթունային ազդեցության գնահատում, էպիգենետիկական փոփոխությունների և օքսիդատիվ սթրեսի հետազոտություն (ղեկ.՝ կ.գ.թ. Ա.Ստեփանյան):

Հակավիրուսային դեղամիջոցների հայտնաբերման լաբորատորիայի կողմից ստեղծված վիրտուալ սքրինինգի մոտեցմամբ հայտնաբերվել են նոր քիմիական միացություններ,

որոնք արդյունավետորեն ճնշում են տարբեր ՌՆԹ և ԴՆԹ վիրուսներ՝ արգելակելով DHODH-ի ֆերմենտային ակտիվությունը (ղեկ.՝ կ.գ.թ. Հ.Զաքարյան):

Ուսումնասիրվել են մարդու գրիպի վիրուսի նեյրամինիդազ և էնդոնուկլեազ սպիտակուցների կրիստալոգրաֆիկ կառուցվածքները, որոնցից ընտրվել են լավագույնները՝ համակարգչային մոդելավորման և սքրինինգի համար: Սքրինինգի արդյունքում կազմվել է քիմիական միացությունների ցանկ, որոնց հակավիրուսային ակտիվությունը պետք է հետազոտվի *in vitro* պայմաններում (ղեկ.՝ կ.գ.թ. Հ.Զաքարյան):

Մշակվել է հակաբիոտիկների նկատմամբ բակտերիաների պատասխանի մոլեկուլային մեխանիզմները բացահայտող նոր տեխնոլոգիա: Բացահայտվել է ռիբոսոմային և ոչ ռիբոսոմային մեխանիզմով ազդող հակաբիոտիկների ուղղակի և անուղղակի ազդեցությունը տրանսլյացիայի վրա (ղեկ.՝ կ.գ.թ. Լ.Ներսիսյան):

Հավաքագրվել են քաղցկեղածին/ոչ քաղցկեղածին միացությունների տվյալների շտեմարան, ինչպես նաև քաղցկեղային/առողջ հյուսվածքների և քիմիական միացություններով մակածված գենային էքսպրեսիայի տվյալների շտեմարաններ: Դուրս են բերվել քաղցկեղածին ակտիվության համար պատասխանատու տոքսիկոֆորներ, մշակվել է մոտեցում հայտնաբերված տոքսիկոֆորների ազդեցության մեխանիզմը նկարագրելու և վտանգավոր ազդեցության ուղու օնտոլոգիան կառուցելու համար: Մշակվել են նախնական մոդելներ միացությունների քաղցկեղածնության հիբրիդային *in silico/in vitro* կանխատեսման համար (ղեկ.՝ կ.գ.թ. Ն.Բաբայան):

Իրականացվել են 14-3-3/N համալիրի 3 մկրվրկ երկարությամբ մոլեկուլային դինամիկայի սիմուլյացիաներ, որոնց արդյունքում ստացված հետազոտվել են ըստ RMSD, MM-(PB/GB)-SA արժեքների, համալիրի կապման կայքերի միջև եղած հեռավորության և X-ray 14-3-3/N-պեպտիդ կառուցվածքի (ղեկ.՝ Ն.Մուրադյան):

Իրականացվել է Ընտանեկան միջերկրածովյան տենդով հիվանդ և առողջ խմբերում *MEFV* գենի ամբողջական սեքվենավորում և ինֆլամասոմի գենների էքսպրեսիայի գնահատում: Նախնական հետազոտությունը ցույց է տվել *Casp1*, *MEFV*, *p65* գենների էքսպրեսիայի փոփոխություններ ԸՄՏ-ի ժամանակ, ինչը հաստատում է այս հիվանդության ժամանակ պիրինի ինֆլամասոմի ակտիվացման մասին առկա պատկերացումները (ղեկ.՝ Լ.Դուկասյան):

Իրականացվել է Եղեգիս-1 քարայրից պեղված բրածո նմուշների ռադիոածխածնային թվագրում: Բրածո ոսկորները նույնականացվել են մորֆոլոգիապես և մոլեկուլային եղանակով: Հայտնաբերվել է 13 կենդանատեսակ: Ուսումնասիրվել են կենդանիների բրածո ատամնաէմալի մանրադիտակային փոփոխությունները, գնահատվել է էմալի ածխածնի և թթվածնի իզոտոպների հարաբերակցությունը (ղեկ.՝ Ս.Մկրտչյան):

Իրականացվել է կրկնօրինակների փոխանակմամբ դիսկրետ մոլեկուլային դինամիկա (RX- $\pi$ DMD) 14-3-3 $\sigma$  սպիտակուցի և ֆոսֆորիլացված պեպտիդների համալիրների համար, որոնք ստացվել են p53, պիրինի և SARS-CoV-2-ի նուկլեոկապսիդ սպիտակուցներից: Համալիրներից յուրաքանչյուրի համար RX- $\pi$ DMD-ն իրականացվել է 32 կրկնօրինակների միջոցով՝ յուրաքանչյուրը 200 նվրկ տևողությամբ: Օգտագործելով Ohm ալգորիթմը և հիմնվելով պեպտիդների փոխազդեցության կայքի վրա՝ կանխատեսվել է ալոստերիկ լիգանդի փոխազդեցության կայք՝ սպիտակուց-սպիտակուցային փոխազդեցությունները մոդուլացնելու համար: Կանխատեսված կայքը հաստատվել է նաև RX- $\pi$ DMD արդյունքներով, որոնք ցույց են տվել, որ կայքը ձևավորվում է միայն այն դեպքում, երբ 14-3-3-ը փոխազդում է սպիտակուցների կամ դրանցից ստացված ֆոսֆոպեպտիդների հետ (ղեկ.՝ կ.գ.թ. Գ.Առաքելով):

#### **4. Կիրառական աշխատանքների արդյունքները**

Մշակվել են մոդելներ քիմիական միացությունների ADMET պարամետրերը *in silico* կանխատեսելու համար: Բոլոր մոդելները մշակվել են կարգավորող մարմինների ուղեցույցներին համապատասխան, այդ թվում՝ ICH M7, REACH, ECHA-16-B-09 և OECD 37849783: Մոդելները ստեղծվել են ինչպես դասական, այնպես էլ մեքենայական ուսուցման ալգորիթմների կիրառմամբ և վավերացվել են: Մոդելները կիրառելի են նոր դեղամիջոցների մշակմամբ, շրջակա միջավայրի աղտոտվածության ուսումնասիրությամբ, ագրոքիմիկատների կամ կոսմետիկ միացությունների մշակմամբ զբաղվող հետազոտական խմբերի և լաբորատորիաների համար: Այս մոդելները ազատ օգտագործման են և հանդիսանում են այլընտրանք թանկարժեք կոմերցիոն ծրագրերին, որոնց սահմանափակ հասանելիությունը խոչընդոտում է գիտահետազոտական աշխատանքների որակին (դեկ. կ.գ.թ. Ն.Բաբայան):

## 5. 2024 թ. հրապարակումների ցանկը

1. Գրիգորյան Բ.Ա., Սամվելյան Ա.Գ., Միքայելյան Մ.Ն., Մանուկյան Ա.Է., Խաղողի Թոգոս և Սև Արենի սորտի մեխանիկական կազմի ուսումնասիրությունը, «Հետազոտահեն կրթության արդի մարտահրավերներն ու զարգացման հեռանկարները» միջազգային գիտաժողովի գիտական հոդվածների ժողովածու, N550, 2024, էջ 240-249:
2. Паронян А.К., Сравнительный анализ программ предсказания структур белков на примере 14-3-3, “Вестник РАУ”, N1, 2024, с. 56-60.
3. Allentoft M., Sikora M., Refoyo-Martínez A., et al., Population genomics of post-glacial western Eurasia, “Nature”, v. 625, N7994, 2024, pp. 301-311. doi: 10.1038/s41586-023-06865-0
4. Andreev E., Zakaryan H., Harutyunyan T., Molokanova L., Pinaeva U., Rossouw A., Nechaev A., Apel P., Aroutiounian R., Enhancing virus inhibition in track-etched membranes through surface modification with silver nanoparticles and curcumin, “Surfaces and Interfaces”, N53, 2024, 105064. doi.org/10.1016/j.surfin.2024.105064
5. Antonosyan M., Roberts P., Aspaturyan N., Mkrtchyan S., Lucas M., Boxleitner K., Jabbour F., Hovhannisyan A., Cieřlik A., Sahakyan L., Avagyan A., Spengler R., Kandel A., Petraglia M., Boivin N., Yepiskoposyan L., Amano N., Multiproxy evidence for environmental stability in the Lesser Caucasus during the Late Pleistocene, “Quaternary Science Reviews”, N330, 2024, 108559. doi.org/10.1016/j.quascirev.2024.108559
6. Antonosyan M., Saribekyan M., Mkrtchyan S., Hovhannisyan A., Frahm E., Patrick R., Bobokhyan A., Azatyan K., Yepiskoposyan L., Amano N., Yeghegis-1 rockshelter site: new investigations into the late Chalcolithic of Armenia, “Antiquity”, v. 98, N398, 2024, e8. doi.org/10.15184/aqy.2023.201
7. Arakelyan A., Avagyan S., Kurnosov A., Mkrtchyan T., Mkrtchyan G., Zakharyan R., Mayilyan K., Binder H., Temporal changes of gene expression in health, schizophrenia, bipolar disorder, and major depressive disorder, “Schizophrenia (Heidelb)”, v. 10, N1, 2024, 19. doi: 10.1038/s41537-024-00443-7
8. Avagyan H., Hakobyan S., Baghdasaryan B., Arzumanyan H., Poghosyan A., Bayramyan N., Semerjyan A., Sargsyan M., Voskanyan H., Vardanyan T., Karalyan N., Hakobyan L., Abroyan L., Avetisyan A., Karalova E., Semerjyan Z., Karalyan Z., Pathology and Clinics of Naturally Occurring Low-Virulence Variants of African Swine Fever Emerged in Domestic Pigs in the South Caucasus, “Pathogens”, v. 13, N2, 2024, 130. doi: 10.3390/pathogens13020130
9. Chan M., Pourrier M., Eldstrom J., Sahakyan H., Vardanyan V., Fedida D., Dual effects of mefenamic acid on the IKs molecular complex, “British Journal of Pharmacology”, 2024. doi: 10.1111/bph.17389
10. Chilingaryan G., Tamoyan H., Tevosyan A., Babayan N., Hambardzumyan K., Navoyan Z., Aghajanyan A., Khachatryan H., Khondkaryan L., BartSmiles: Generative Masked Language Models for Molecular Representations, “Journal of Chemical Information and Modeling”, v. 64, N15, 2024, pp. 5832-5843. doi: 10.1021/acs.jcim.4c00512
11. Cinar M., Martinez-Medina L., Puvvula P., Arakelyan A., Vardarajan B., Anthony N., Nagaraju G., Park D., Feng L., Sheff F., Mosunjac M., Saxe D., Flygare S., Alese O., Kaufman J., Lonial S., Sarmiento J., Lossos I., Vertino P., Lopez J., El-Rayes B., Bernal-Mizrachi L., Transposon DNA sequences facilitate the tissue-specific gene transfer of circulating tumor DNA between human cells, “Nucleic Acids Research”, v. 52, N13, 2024, pp. 7539-7555. doi: 10.1093/nar/gkae427
12. Davitavyan S., Martirosyan G., Mkrtchyan G., Chavushyan A., Melkonyan A., Ghazaryan H., Binder H., Arakelyan A., Integrated analysis of -omic landscapes in breast cancer subtypes

[version 1; peer review: 2 approved with reservations], "F1000Research", N13, 2024, 564. doi.org/10.12688/f1000research.148778.1

13. Davitavyan S., Multi-omics portrayal of breast cancers, "Vestnik RAU", N1, 2024, pp. 61-66.
14. El-Ayoubi A., Arakelyan A., Klawitter M., Merk L., Hakobyan S., Gonzalez-Menendez I., Quintanilla Fend L., Holm P., Mikulits W., Schwab M., Danielyan L., Naumann U., Development of an optimized, non-stem cell line for intranasal delivery of therapeutic cargo to the central nervous system, "Molecular Oncology", v. 18, N3, 2024, pp. 528-546. doi: 10.1002/1878-0261.13569
15. Everest-Dass A., Nersisyan S., Maar H., Novosad V., Schröder-Schwarz J., Freytag V., Stuke J., Beine M., Schiecke A., Haider M., Kriegs M., Elakad O., Bohnenberger H., Conradi L., Raygorodskaya M., Krause L., von Itzstein M., Tonevitsky A., Schumacher U., Maltseva D., Wicklein D., Lange T., Spontaneous metastasis xenograft models link CD44 isoform 4 to angiogenesis, hypoxia, EMT and mitochondria-related pathways in colorectal cancer, "Molecular Oncology", v. 18, N1, 2024, pp. 62-90. doi: 10.1002/1878-0261.13535
16. Frahm E., Saribekyan M., Mkrtchyan S., Furquim L., Avagyan A., Sahakyan L., Azatyan K., Roberts P., Fernandes R., Yepiskoposyan L., Amano N., Antonosyan M., Increasing obsidian diversity during the Chalcolithic Period at Yeghegis-1 Rockshelter (Armenia) reveals shifts in land use and social networks, "Scientific Reports", v. 14, N1, 2024, 9528. doi: 10.1038/s41598-024-59661-9
17. Gevorgyan S., Khachatryan H., Shavina A., Gharaghani S., Zakaryan H., Targeting SARS-CoV-2 main protease: a comprehensive approach using advanced virtual screening, molecular dynamics, and in vitro validation, "Virology Journal", v. 21, 2024, 330. doi: 10.1186/s12985-024-02607-4
18. Ghukasyan L., Khachatryan G., Sirunyan T., Minasyan A., Hakobyan S., Chavushyan A., Hayrapetyan V., Ghazaryan H., Martirosyan G., Mkrtchyan G., Vardanyan V., Mukuchyan V., Zakharyan R., Arakelyan A., Genewise detection of variants in MEFV gene using nanopore sequencing, "Frontiers in Genetics", N15, 2024, 1493295. doi: 10.3389/fgene.2024.1493295
19. Grigor'eva E., Karapetyan L., Malakhova A., Medvedev S., Minina J., Hayrapetyan V., Vardanyan V., Zakian S., Arakelyan A., Zakharyan R., Generation of iPSCs from a Patient with the M694V Mutation in the MEFV Gene Associated with Familial Mediterranean Fever and Their Differentiation into Macrophages, "International Journal of Molecular Sciences", v. 25, N11, 2024, 6102. doi: 10.3390/ijms25116102
20. Grigoryan B., Mikayelyan M., Kazumyan K., Samvelyan A., Ohanyan A., The study of the biochemical composition of grape and wine from the Armenian selection variety Nrneni, "Bioactive Compounds in Health and Disease", v.7, N10, 2024, pp. 476-488. doi.org/10.31989/bchd.v7i10.1434
21. Harutyunyan M., Melyan G., Sahakyan A., Khazaryan K., Martirosyan Y., Arajyan G., Hovhannisyan M., Assessment of some parameters of the chemical composition of Thymus kotschyanus Boiss. growing in different ecological zones of the Republic of Armenia, "Functional Food Science", v. 4, N9, 2024, pp. 337-348. doi.org/10.31989/ffs.v4i9.1443
22. Hakobyan M., Binder H., Arakelyan A., Pan-cancer analysis of telomere maintenance mechanisms, "Journal of Biological Chemistry", v. 300, N6, 2024, 107392. doi: 10.1016/j.jbc.2024.107392
23. Hayrapetyan V., Karapetyan L., Ghukasyan L., Atshemyan S., Ghazaryan H., Vardanyan V., Mukuchyan V., Arakelyan A., Zakharyan R., Association of inflammasome gene expression

- levels with pathogenesis of Familial Mediterranean fever in Armenians, “International Journal of Molecular Sciences”, N25, 2024, 12958. doi.org/10.3390/ijms252312958
24. Hovhannisyan A., Delser P., Hakobyan A., Jones E., Schraiber J., Antonosyan M., Margaryan A., Xue Z., Jeon S., Bhak J., Hrechdakian P., Sahakyan H., Saag L., Khachatryan Z., Yepiskoposyan L., Manica A., Demographic history and genetic variation of the Armenian population, “American Journal of Human Genetics”, 2024, S0002-9297(24)00391-4. doi: 10.1016/j.ajhg.2024.10.022
  25. Izmailyan R., Matevosyan M., Khachatryan H., Shavina A., Gevorgyan S., Ghazaryan A., Tirosoyan I., Gabrielyan Y., Ayvazyan M., Martirosyan B., Harutyunyan V., Zakaryan H., Discovery of new antiviral agents through artificial intelligence: In vitro and in vivo results, “Antiviral Research”, N222, 2024, 105818. doi: 10.1016/j.antiviral.2024.105818
  26. Jackman J., Hakobyan A., Grigoryan R., Izmailyan R., Elrod C., Zakaryan H., Antiviral screening of natural, anti-inflammatory compound library against African swine fever virus, “Virology Journal”, v. 21, N1, 2024, 95. doi: 10.1186/s12985-024-02374-2
  27. Jędrychowska J., Vardanyan V., Wieczor M., Marciniak A., Czub J., Amini R., Jain R., Shen H., Choi H., Kuznicki J., Korzh V., Mutant analysis of Kcng4b reveals how the different functional states of the voltage-gated potassium channel regulate ear development, “Developmental Biology”, N513, 2024, pp. 50-62. doi: 10.1016/j.ydbio.2024.03.002
  28. Karalyan Z., Ghonyan S., Poghosyan D., Hakobyan L., Avagyan H., Avetisyan A., Abroyan L., Poghosyan A., Hakobyan S., Manukyan G., Infection of Human Macrophage-Like Cells by African Swine Fever Virus, “Frontiers in Bioscience (Landmark Ed)”, v. 29, N4, 2024, 164. doi: 10.31083/j.fbl2904164
  29. Khachatryan H., Matevosyan M., Harutyunyan V., Gevorgyan S., Shavina A., Tirosoyan I., Gabrielyan Y., Ayvazyan M., Bozdaganyan M., Fakhar Z., Gharaghani S., Zakaryan H., Computational evaluation and benchmark study of 342 crystallographic holo-structures of SARS-CoV-2 Mpro enzyme, “Scientific Reports”, v. 14, N1, 2024, 14255. doi: 10.1038/s41598-024-65228-5
  30. Konecny T., Asatryan A., Nikoghosyan M., Binder H., Unveiling Iso- and Aniso-Hydric Disparities in Grapevine-A Reanalysis by Transcriptome Portrayal Machine Learning, “Plants (Basel)”, v. 13, N17, 2024, 2501. doi: 10.3390/plants13172501
  31. Martirosyan A., Kriegova E., Savara J., Abroyan L., Ghonyan S., Slobodova Z., Nesnadna R., Manukyan G., Impact of antiphospholipid syndrome on placenta and uterine NK cell function: insights from a mouse model, “Scientific Reports”, v.14, N1, 2024, 31163. doi: 10.1038/s41598-024-82451-2
  32. Melyan G., Barseghyan A., Dangyan K., Sahakyan N., Vardanyan A., Martirosyan Y., Impact of aeroponic cultivation and plant growth regulators on the biochemical composition of grapevine leaves, “Functional Food Science”, v. 4, N10, 2024, pp. 359-369. doi.org/10.31989/ffs.v4i10.1458
  33. Melyan G., Sahakyan A., Barseghyan A., Dangyan K., Sahakyan N., Sargsyan K., Martirosyan Y., Micropropagation of (*Vitis vinifera* L.) cultivar 'Sev Khardji' using biotechnological approaches and its impact on leaf quality, “Functional Food Science”, v. 4, N7, 2024, pp. 277-291. doi.org/10.31989/ffs.v4i7.1395
  34. Melyan G., Sahakyan A., Barseghyan A., Dangyan K., Sahakyan N., Zadayan M., Martirosyan Y., Effect of the culture liquid of Antarctic yeast *Nadsoniella nigra* on rooting, growth, and biochemical composition of in vitro grapevine (*Vitis vinifera* L.), cultivar 'Karmrahyut', “Functional Foods in Health and Disease”, v. 14, N11, 2024, pp. 766-779. doi.org/10.31989/ffhd.v14i11.1474

35. Mikulkova Z., Gallo J., Manukyan G., Trajerova M., Savara J., Shrestha B., Dyskova T., Nesnadna R., Slobodova Z., Stefancik M., Kriegova E., Complexity of synovial fluid-derived monocyte-macrophage-lineage cells in knee osteoarthritis, "Cell Reports", v. 43, N12, 2024, 115011. doi: 10.1016/j.celrep.2024.115011
36. Mkrtchyan L., Sahakyan H., Eldstrom J., Karapetyan T., Abrahamyan A., Nazaryan K., Schwarz J., Kneussel M., Fedida D., Vardanyan V., Ion permeation through a narrow cavity constriction in KCNQ1 channels: Mechanism and implications for pathogenic variants, "Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America", v. 121, N51, 2024, e2411182121. doi: 10.1073/pnas.2411182121
37. Muradyan N., Arakelov V., Sargsyan A., Paronyan A., Arakelov G., Nazaryan K., Impact of mutations on the stability of SARS-CoV-2 nucleocapsid protein structure, "Scientific Reports", v. 14, N1, 2024, 5870. doi: 10.1038/s41598-024-55157-8
38. Nersesova L., Petrosyan M., Pogosyan L., Gazaryants M., Kazaryan G., Zanginyan H., Arakelova E., Ayyazyan V., Tsakanova G., Evaluation of the Low-Energy Ultrashort Pulsed Electron Beam Irradiation-Induced Oxidative Stress and Adaptive Response of Select Enzymes in a Rat Brain, "Neurochemical Journal", N18, 2024, pp. 448-458. doi.org/10.1134/S1819712424700053
39. Nersesova L., Petrosyan M., Tsakanova G., Review of the evidence of radioprotective potential of creatine and arginine as dietary supplements, "International Journal of Radiation Biology", v. 100, N6, 2024, pp. 849-864. doi: 10.1080/09553002.2024.2345098
40. Pathak A., Simonian H., Ibrahim I., Hrechdakian P., Behar D., Ayub Q., Arsanov P., Metspalu E., Yepiskoposyan L., Rootsi S., Endicott P., Villems R., Sahakyan H., Human Y chromosome haplogroup L1-M22 traces Neolithic expansion in West Asia and supports the Elamite and Dravidian connection, "iScience", v. 27, N6, 2024, 110016. doi: 10.1016/j.isci.2024.110016
41. Poghosyan A., Hakobyan S., Avagyan H., Avetisyan A., Bayramyan N., Hakobyan L., Abroyan L., Davtyan A., Poghosyan D., Baghdasaryan B., Arakelova E., Karalova E., Karalyan Z., The role of gastropods in African swine fever virus ecology, "Virology Journal", v. 21, N1, 2024, 180. doi: 10.1186/s12985-024-02444-5
42. Stepanyan A., Brojakowska A., Zakharyan R., Hakobyan S., Davitavyan S., Sirunyan T., Khachatryan G., Khlghatyan M., Bisserier M., Zhang S., Sahoo S., Hadri L., Rai A., Garikipati V., Arakelyan A., Goukassian D., Evaluating sex-specific responses to western diet across the lifespan: impact on cardiac function and transcriptomic signatures in C57BL/6J mice at 530 and 640/750 days of age, "Cardiovascular Diabetology", v. 23, N1, 2024, 454. doi: 10.1186/s12933-024-02565-9
43. Turnbull K., Paternoga H., von der Weth E., Egorov A., Pochopien A., Zhang Y., Nersisyan L., Margus T., Johansson M., Pelechano V., Wilson D., Hauryliuk V., The ABCF ATPase New1 resolves translation termination defects associated with specific tRNA<sup>Arg</sup> and tRNA<sup>Lys</sup> isoacceptors in the P site, "Nucleic Acids Research", v. 52, N19, 2024, pp. 12005-12020. doi: 10.1093/nar/gkae748
44. Yengoyan A., Gomktsyan T., Pivazyan V., Ghazaryan E., Shainova R., Karapetyan A., Avetyan D., Aslanyan L., Baroyan K., Tuzikov A., Sargsyan M., Baghdasaryan B., Bayramyan N., Hakobyan S., Poghosyan A., Avetisyan A., Avagyan H., Hakobyan L., Karalyan Z., Study of different heterocycles showing significant anti-severe acute respiratory syndrome 2 activity in vitro and in vivo, "Veterinary World", v. 17, N6, 2024, pp. 1281-1290. doi: 10.14202/vetworld.2024.1281-1290

**6. Տնօրենի, գիտական գծով փոխտնօրենի և գիտքարտուղարի գիտական աստիճանը, անունը, ազգանունը**

Մոլեկուլային կենսաբանության ինստիտուտ

Տնօրեն՝ կ.գ.դ. Ա.Առաքելյան

Գիտքարտուղար՝ կ.գ.թ. Զ.Խաչատրյան

Էլեկտրոնային փոստ՝ imb@sci.am

Կայքէջ՝ <http://www.molbiol.sci.am>

**Մասնագիտական խորհուրդ 042՝ «Կենսաքիմիա»**

Նախագահ՝ կ.գ.դ. Ա.Առաքելյան, գիտքարտուղար՝ կ.գ.թ. Ռ.Զախարյան

**7. Հաշվետու տարում պաշտպանված դոկտորական և թեկնածուական ատենախոսությունների քանակը**

Պաշտպանվել է 1 թեկնածուական ատենախոսություն:

**8. Տեղեկություններ հաշվետու տարում պատվավոր կոչումների և պարգևատրումների արժանացած գիտնականների մասին**

- Լիլիթ Ղուկասյան, լավագույն պաստառ և բանավոր զեկույց, «Լոմոնոսով»-2024 միջազգային երիտասարդական գիտական ֆորում
- Միրաս Հակոբյան և Ռոքսանա Զախարյան, լավագույն զեկույցի մրցանակ ERRS-2024, Պորտուգալիա
- Գայանե Մանուկյան, Պալացկու համալսարանի դեկանի մրցանակ «Ակնառու հրատարակության» համար
- Քրիստինե Մարգարյան, ՀՀ ԳԱԱ 2023 թվականի մրցանակի հաղթող Քիմիայի, կյանքի և երկրի մասին գիտությունների հիմնարար հետազոտությունների բնագավառում
- Արսեն Առաքելյան, ՀՀ ԳԱԱ և Ռուսաստանի հայերի միության «Լավագույն գիտական աշխատանք» երիտասարդ գիտնականների համար մրցույթի «Կյանքի մասին գիտություններ» անվանակարգում 1-ին կարգի մրցանակ
- Գրիգոր Առաքելով, ՀՌՀ-ի 2024 տարվա լավագույն դասախոս

**9. Գիտության և կրթության ոլորտում համագործակցությունը ՀՀ բուհերի և այլ կազմակերպությունների հետ՝ նշելով համատեղողների թվաքանակն ըստ կազմակերպությունների, յուրաքանչյուր կազմակերպության հետ համատեղ հրապարակումները**

- ՀՀ ԳԱԱ՝ 1 համատեղող
- ՀՀ ԳԱԱ գիտակրթական միջազգային կենտրոն՝ 14 համատեղող
- Հայ-Ռուսական համալսարան՝ 19 համատեղող, 9 հոդված
- Երևանի պետական համալսարան, 4 համատեղող, 2 հոդված
- Երևանի պետական բժշկական համալսարան՝ 5 համատեղող, 4 հոդված
- Մոսկվայի պետական համալսարանի երևանյան մասնաճյուղ՝ 1 համատեղող
- Հայաստանի ազգային ագրարային համալսարան, 2 համատեղող, 5 հոդված
- ՀՀ ԳԱԱ հնագիտության և ազգագրության ինստիտուտ, 1 համատեղող, 1 հոդված
- ՀՀ ԳԱԱ Ինֆորմատիկայի և ավտոմատացման պրոբլեմների ինստիտուտ, 1 համատեղող, 1 հոդված
- Հայաստանի կենսաինֆորմատիկայի ինստիտուտ, 6 համատեղող, 6 հոդված
- «Դե նովո սայենսիս» ընկերություն՝ 5 համատեղող, 2 հոդված

- «Տոքսոմետրիս» ընկերություն՝ 5 համատեղող, 1 հոդված
- «Դավիդյանց լաբորատորիաներ», 1 համատեղող, 1 հոդված
- Ավանդական բժշկության համալսարան՝ 2 համատեղող, 1 հոդված
- Եվրասիա միջազգային համալսարան՝ 1 համատեղող
- Երևանի Հայբուսակ համալսարան՝ 1 համատեղող

**10. Տեղեկություն համատեղ միավորումների (ամբիոններ, լաբորատորիաներ և այլն) մասին**

- Կենսաինժեներիայի, կենսաինֆորմատիկայի և մոլեկուլային կենսաբանության բազային ամբիոն՝ Հայ-Ռուսական համալսարանի հետ համատեղ
- Մոլեկուլային և բջջային կենսաբանության ամբիոն՝ ՀՀ ԳԱԱ գիտակրթական միջազգային կենտրոնի հետ համատեղ
- «ՔԵՆԴԼ» - ՄԿԻ փորձարարական կենսաբանության համատեղ լաբորատորիա

Տնօրեն՝ կ.գ.դ. Ա.Առաքելյան

Գիտքարտուղար՝ կ.գ.թ. Զ.Խաչատրյան

**2024թ. թեմատիկայի ամփոփ տվյալներ**

| № | Կազմակերպությունը | Թեմաների կամ պայմանագրերի թիվը (n) և ֆինանսավորման ծավալը (X հազ. դր.) |                       |                                    |                 |
|---|-------------------|------------------------------------------------------------------------|-----------------------|------------------------------------|-----------------|
|   |                   | Նպատակային ֆինանսավորում                                               | Բազային ֆինանսավորում | Գիտկոմից ստացված այլ ֆինանսավորում | Տնտ.պայմանագրեր |
| 1 | 2                 | 3                                                                      | 4                     | 5                                  | 6               |
| 1 | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | 1<br>16,900                                                            | 1<br>308,070.76       | 31<br>344,774                      | 4<br>1,213.3    |

**Արտոնագրային ցուցանիշներ**

| № | Կազմակերպությունը | Արտոնագրերի հայտերի թիվը | Դրական որոշումների թիվը | Ստացված արտոնագրերի թիվը |
|---|-------------------|--------------------------|-------------------------|--------------------------|
| 1 | 2                 | 3                        | 4                       | 5                        |

**Կազմակերպության անցկացրած հանրապետական և միջազգային գիտական միջոցառումներ**

| № | Միջոցառման անվանումը                                                                                                                       | Անցկացման վայրն ու ժամանակը, կազմակերպիչները                                                                    | Մասնակիցների թիվը |                           |
|---|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------|---------------------------|
|   |                                                                                                                                            |                                                                                                                 | ընդամենը          | այդ թվում՝ արտ. երկրներից |
| 1 | 2                                                                                                                                          | 3                                                                                                               | 4                 | 5                         |
| 1 | «Նյարդագիտության շաբաթ (Neuroscience Week) 2024» միջազգային համատեղ գիտաժողովի շրջանակում մոլեկուլային նյարդագիտությանը նվիրված սիմպոզիում | ԵՊԲՀ<br>մայիսի 18<br>ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ                                                                                 | 3                 | 0                         |
| 2 | «Գենոմ-կենսաինֆորմատիկա առողջության համար (Genome Bioinformatics for Health)» աշխատաժողով                                                  | Լայպցիգի, Գերմանիա<br>հունիս 12 – 14<br>Հայաստանի կենսաինֆորմատիկայի ինստիտուտ, ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ, Լայպցիգի համալսարան | 27                | 15                        |
| 3 | Հանդիպում Չինաստանի Շանդոնգի 1-ին բժշկական համալսարանի պատվիրակության հետ                                                                  | ՀՀ ԳԱԱ<br>հուլիսի 8<br>ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ                                                                               | 15                | 4                         |
| 4 | «OMICSS-2024» Գենոմ-կենսաինֆորմատիկա ամառային դպրոց                                                                                        | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ<br>հունիս 21 – օգոստոս 24<br>Հայաստանի կենսաինֆորմատիկայի ինստիտուտ, ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ, Լայպցիգի համալսարան | 60                | 15                        |

**Աշխատակիցների արտասահման (այդ թվում՝ ԱՊՀ երկրներ) կատարած գործուղումներ**

| №  | Կազմակերպությունը | Երկիրը       | Գործուղված գիտնականների թվաքանակը |                                    |                                         |
|----|-------------------|--------------|-----------------------------------|------------------------------------|-----------------------------------------|
|    |                   |              | Գիտաժողովներին մասնակցելու        | Համատեղ գիտական աշխատանք կատարելու | Բանակցությունների և քննարկումների համար |
| 1  | 2                 | 3            | 4                                 | 5                                  | 6                                       |
| 1  | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | Գերմանիա     | 11                                | 5                                  | 3                                       |
| 2  | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | Չեխիա        |                                   | 4                                  |                                         |
| 3  | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | Ֆրանսիա      | 1                                 | 1                                  |                                         |
| 4  | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | Պորտուգալիա  | 6                                 |                                    |                                         |
| 5  | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | Իտալիա       | 2                                 |                                    |                                         |
| 6  | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | Իսպանիա      | 1                                 |                                    |                                         |
| 7  | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | Բելգիա       |                                   |                                    | 1                                       |
| 8  | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | Ավստրիա      |                                   |                                    | 1                                       |
| 9  | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | Նիդերլանդներ |                                   | 1                                  |                                         |
| 10 | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | Շվեդիա       |                                   |                                    | 1                                       |
| 11 | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | Նորվեգիա     |                                   | 1                                  |                                         |
| 12 | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | Իռլանդիա     | 1                                 |                                    |                                         |
| 13 | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | Դանիա        | 1                                 |                                    |                                         |
| 14 | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | Հունաստան    |                                   | 1                                  |                                         |
| 15 | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | Սինգապուր    |                                   | 1                                  |                                         |
| 16 | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | Չինաստան     |                                   | 1                                  |                                         |
| 17 | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | ԱՄՆ          |                                   | 1                                  |                                         |
| 18 | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | ՌԴ           | 5                                 | 2                                  | 1                                       |
| 19 | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | Ղազախստան    |                                   |                                    | 1                                       |
| 20 | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | Վրաստան      | 1                                 |                                    |                                         |

Աղյուսակ 5

Կազմակերպությունում արտասահմանյան գիտնականների ընդունելություն

| № | Կազմակերպությունը | Երկիրը   | Ընդունված գիտնականների թվաքանակը |                                    |                                         |
|---|-------------------|----------|----------------------------------|------------------------------------|-----------------------------------------|
|   |                   |          | Գիտաժողովներին մասնակցելու       | Համատեղ գիտական աշխատանք կատարելու | Բանակցությունների և քննարկումների համար |
| 1 | 2                 | 3        | 4                                | 5                                  | 6                                       |
| 1 | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | ԱՄՆ      |                                  | 1                                  | 1                                       |
| 2 | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | Գերմանիա |                                  | 2                                  | 1                                       |
| 3 | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | Բրազիլիա |                                  | 1                                  |                                         |
| 4 | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | ՌԴ       |                                  |                                    | 1                                       |

Աղյուսակ 6

Կազմակերպության միջազգային դրամաշնորհներ

| № | Կազմակերպությունը | Թեմայի անվանումը | Հիմնադրամի կամ կազմակերպության անվանումը | Դրամաշնորհի ժամկետը |       | Ֆինանսավորման ծավալը (\$, €, GBP, руб., դր. և այլն) |              | Թեմայի ղեկավարը |
|---|-------------------|------------------|------------------------------------------|---------------------|-------|-----------------------------------------------------|--------------|-----------------|
|   |                   |                  |                                          | սկիզբ               | ավարտ | ընդհանուր                                           | 2024թ. համար |                 |
| 1 | 2                 | 3                | 4                                        | 5                   | 6     | 7                                                   | 8            |                 |

|   |            |                                                                                                           |                                                  |           |                |                |              |
|---|------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------|-----------|----------------|----------------|--------------|
| 1 | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ | Մոլեկուլային և բջջային կենսաբանության գործնական ուսուցում Հայաստանի երկու ռազմավարական համալսարաններում   | Ֆոլքսվազեն հիմնադրամ                             | 2021-2024 | 142,100 €      | 19,000 €       | Վ. Վարդանյան |
| 2 | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ | Տվյալահեն կյանքի մասին գիտությունները գենոմային առողջապահության մեջ                                       | ՀՀ ԿԳՄՄՆ ԳԿ - ԳԿՀԴՆ                              | 2024-2026 | 16,000,000 դր. | 11,467,870 դր. | Ա. Առաքելյան |
| 3 | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ | Խաղողի սելեկցիայի ազգային ծրագրի վերսկսում և հայկական Vitis sylvestris-ի կիրառումը ռեզիստենտ սելեկցիայում | ՀՀ ԿԳՄՄՆ ԳԿ - ԳԿՀԴՆ                              | 2024-2026 | 16,000,000 դր. | 6,596,726 դր.  | Ք. Մարգարյան |
| 4 | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ | Մոլեկուլային գենետիկական թեստավորման նոր համակարգի մշակումը ընտանեկան միջերկրածովյան տենդի համար          | Ամերիկայի հայ ճարտարագետներ և գիտնականներ (AESA) | 2023-2025 | 10,300 \$      | 8,565 \$       | Ռ. Զախարյան  |

Աղյուսակ 7

ԳԱԱ գիտաշխատողների 2024թ. հրապարակումների ընդհանուր քանակը

| № | Կազմակերպությունը | Մենագրություններ, հոդվածների ժողովածուներ, գրքեր |           | Դասագրքեր, ուսումնական ձեռնարկներ |           | Հոդվածներ գրախոսվող ամսագրերում |           | Հոդվածներ գիտաժողովների նյութերի ժողովածուներում |           | Թեզիսներ  |           |
|---|-------------------|--------------------------------------------------|-----------|-----------------------------------|-----------|---------------------------------|-----------|--------------------------------------------------|-----------|-----------|-----------|
|   |                   | Հանրապետ.                                        | Արտասահմ. | Հանրապետ.                         | Արտասահմ. | Հանրապետ.                       | Արտասահմ. | Հանրապետ.                                        | Արտասահմ. | Հանրապետ. | Արտասահմ. |
| 1 | 2                 | 3                                                | 4         | 5                                 | 6         | 7                               | 8         | 9                                                | 10        | 11        | 12        |
| 1 | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | -                                                | -         | -                                 | -         | 2                               | 41        | 1                                                | -         | 4         | 5         |

Աղյուսակ 8

Տվյալներ ԳԱԱ համակարգում գործող մասնագիտական խորհուրդների վերաբերյալ

| № | Կազմակերպությունը | Ատենախոսության խորհրդի ծածկագիրը | Մասնագիտության ծածկագիրը և անվանումը | Խորհրդի նախագահը, գիտքարտուղարը (գիտ.աստիճան, անուն, ազգանուն) | 2024թ. կազմակերպության աշխատակիցների կողմից պաշտպանված ատենախոսությունների թիվը |              |
|---|-------------------|----------------------------------|--------------------------------------|----------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------|--------------|
|   |                   |                                  |                                      |                                                                | դոկտորական                                                                      | թեկնածուական |
| 1 | 2                 | 3                                | 4                                    | 5                                                              | 6                                                                               | 7            |

|   |            |     |                                                              |                                                                                |   |   |
|---|------------|-----|--------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------|---|---|
| 1 | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ | 042 | Գ.00.03<br>Մոլեկուլային<br>և բջջային<br>կենսաբա-<br>նություն | Նախագահ՝ կ.գ.դ.<br>Արսեն Առաքելյան<br>Գիտքարտուղար՝ կ.գ.թ.<br>Ռոբսանա Զախարյան | - | - |
| 2 | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ | 042 | Գ.00.04<br>Կենսաքիմիա                                        | Նախագահ՝ կ.գ.դ.<br>Արսեն Առաքելյան<br>Գիտքարտուղար՝ կ.գ.թ.<br>Ռոբսանա Զախարյան | - | - |

Աղյուսակ 9

Աշխատողների թվաքանակի ամփոփ տվյալներն առ 01.01.2025թ.

| № | Կազմակերպությունը | Աշխատողների ընդհանուր թիվը | Գիտական աշխատողների ընդհանուր թիվը | ՀՀ ԳԱԱ ակադեմիկոսներ | ՀՀ ԳԱԱ թղթակից անդամներ | Գիտության դոկտորներ | Գիտության թեկնածուներ |
|---|-------------------|----------------------------|------------------------------------|----------------------|-------------------------|---------------------|-----------------------|
| 1 | 2                 | 3                          | 4                                  | 5                    | 6                       | 7                   | 8                     |
| 1 | ՀՀ ԳԱԱ ՄԿԻ        | 142                        | 104                                | -                    | -                       | 6                   | 54                    |

Աղյուսակ10

ԳԱԱ համակարգում աշխատող գիտական կադրերի 2024թ. ատեստավորման արդյունքները

|                                 | Գիտական կադրերի թիվը              | Ատեստավորման ենթակա անձանց թիվը | Ատեստավորմանը մասնակցած անձանց թիվը | Ատեստավորման արդյունքները               |                                    |                                  |                       |   |
|---------------------------------|-----------------------------------|---------------------------------|-------------------------------------|-----------------------------------------|------------------------------------|----------------------------------|-----------------------|---|
|                                 |                                   |                                 |                                     | համապատասխանել են զբաղեցրած պաշտոններին | բարձրացվել են զբաղեցրած պաշտոնները | իջեցվել են զբաղեցրած պաշտոններից | ազատվել են աշխատանքից |   |
| 1                               | 2                                 | 3                               | 4                                   | 5                                       | 6                                  | 7                                | 8                     | 9 |
| Գիտական պաշտոններ               |                                   |                                 |                                     |                                         |                                    |                                  |                       |   |
| 1                               | Կրտսեր գիտաշխատող                 |                                 |                                     |                                         |                                    |                                  |                       |   |
| 2                               | Գիտաշխատող                        |                                 |                                     |                                         |                                    |                                  |                       |   |
| 3                               | Ավագ գիտաշխատող                   |                                 |                                     |                                         |                                    |                                  |                       |   |
| 4                               | Առաջատար գիտաշխատող               |                                 |                                     |                                         |                                    |                                  |                       |   |
| 5                               | Գլխավոր գիտաշխատող                |                                 |                                     |                                         |                                    |                                  |                       |   |
| Ընդամենը՝                       |                                   |                                 |                                     |                                         |                                    |                                  |                       |   |
| Ճարտարագիտատեխնիկական պաշտոններ |                                   |                                 |                                     |                                         |                                    |                                  |                       |   |
| 1                               | Լաբորանտ կամ ճարտարագետ           |                                 |                                     |                                         |                                    |                                  |                       |   |
| 1                               | 2                                 | 3                               | 4                                   | 5                                       | 6                                  | 7                                | 8                     | 9 |
| 2                               | Ավագ լաբորանտ կամ ավագ ճարտարագետ |                                 |                                     |                                         |                                    |                                  |                       |   |
| Ընդամենը՝                       |                                   |                                 |                                     |                                         |                                    |                                  |                       |   |
| Գիտական ղեկավար պաշտոններ       |                                   |                                 |                                     |                                         |                                    |                                  |                       |   |
| 1                               | Գիտական խմբի ղեկավար              |                                 |                                     |                                         |                                    |                                  |                       |   |

|           |                       |  |  |  |  |  |  |  |
|-----------|-----------------------|--|--|--|--|--|--|--|
| 2         | Լաբորատորիայի վարիչ   |  |  |  |  |  |  |  |
| 3         | Սեկտորի վարիչ         |  |  |  |  |  |  |  |
| 4         | Բաժանմունքի ղեկավար   |  |  |  |  |  |  |  |
| 5         | Կենտրոնի ղեկավար      |  |  |  |  |  |  |  |
| 6         | Այլ ղեկավար պաշտոններ |  |  |  |  |  |  |  |
| Ընդամենը՝ |                       |  |  |  |  |  |  |  |
| ԸՆԴԱՄԵՆԸ՝ |                       |  |  |  |  |  |  |  |

**Институт молекулярной биологии НАН РА**

**Отчет за 2024 год**

## 1. Важнейшие результаты

Первое исследование полногеномных последовательностей современных и древних образцов ДНК у населения Армянского нагорья опровергло теорию о балканском происхождении армян. Полученные результаты исключают ассирийское происхождение сасунцев и показывают, что население этого высокогорного региона, в отличие от других территориальных групп армян, в недавнем прошлом значительно сократилось. При проверке гипотезы о генетической преемственности населения Армянского нагорья установлено заметное влияние на генофонд армян неолитических земледельцев из Леванта. Установлено, что популяции западных, центральных и восточных областей Армянского нагорья генетически очень близки, что свидетельствует об общей демографической истории географически различных групп армян (рук. д.б.н. Л.Епископосян).

## 2. Результаты, полученные по базовому финансированию

Длительная гипергликемия нарушает типичную функциональную дихотомию макрофагов M1 и M2, что может объяснить смешанную поляризацию тканевых макрофагов при метаболическом синдроме, связанном с хронической гипергликемией. Впервые был охарактеризован клеточный состав синовиальной жидкости у пациентов с остеоартритом, выявивший преобладание миелоидных дендритных клеток. Высокое содержание миелоидных дендритных клеток ассоциировано с более легкой степенью повреждения суставов и ранним этапом заболевания (рук. к.б.н. Г.Манукян).

Среди клинических изолятов *Klebsiella pneumoniae*, выделенных в 2023 и 2024 гг., обнаружены штаммы с множественной лекарственной устойчивостью (МЛУ), которые были охарактеризованы на основе полногеномного анализа. Впервые в Армении выявлены штаммы, принадлежащие к новому МЛУ клону высокого риска *K. pneumoniae* ST39, которые генетически близки (99.98%) к штаммам, выделенным в Эфиопии в 2020 г. Установлено наибольшее сходство клинических штаммов из Армении с ST395 со штаммами из России и Германии (99.96-99.98%), а ST307 штаммов - со штаммами из США (99.97-99.98%). Эти штаммы дополнили коллекцию клинических изолятов возбудителей наиболее распространенных в Армении бактериальных инфекций, которая хранится в институте (рук. к.б.н. А.Седракян).

Используя методы построения фармакофорных моделей, виртуального скрининга и искусственного интеллекта, идентифицированы новые химические структуры, подавляющие активность фермента MPRO SARS-CoV-2. Обнаружен противовирусный эффект ингибитора клеточного миристилирования IMP1088 на вирус африканской чумы свиней и вирус простого герпеса 1 типа (рук. к.б.н. О.Закарян).

Для вируса Нипах W и человеческого белкового комплекса 14-3-3 было смоделировано 1000 структур, и 9 лучших кандидатов были отобраны для дальнейших экспериментов. В качестве возможных модуляторов белок-белкового взаимодействия, из баз данных химических соединений ZINC, ChemSpace, ChEMBL, iPPI-DB, Enamine и PubChem создана библиотека из 500,000 соединений, соответствующих стандартам фармакологически активных соединений (рук. д.б.н. К.Назарян).

Во время раскопок в пещере Ехегис (область Вайоц Дзор) обнаружено 8490 костных останков. 604 из них были подвергнуты молекулярной идентификации методом ZooMS с выделением 13 видов животных. Результаты морфологической и молекулярной идентификации ископаемых костей показывают, что структура биоразнообразия сохраняется неизменной во всех слоях пещеры Ехегис-1, что подтверждает отсутствие заметных различий в образе жизни энеолитических сообществ (рук. д.б.н. Л.Епископосян).

Показано, что индукция сублетальных (50% выживаемость) повреждений ДНК в опухолевых клетках крови стимулирует экспрессию белка APEX1, кодируемого геном *Ref-1*. Подавление этого гена с помощью технологии РНК-интерференции значительно повышает чувствительность раковых клеток с 80% гибелью клеток (64% апоптотическим путем), при этом оказывая слабое влияние на здоровые клетки (выживаемость 49%). Таким образом, ген *Ref-1* является перспективной целью для синтетической летальности (рук. к.б.н. Н.Бабаян).

Разработаны трехмерные клеточные модели опухолей молочной железы и головного мозга (глиобластомы), охарактеризована динамика роста этих моделей в условиях длительного культивирования (до 30 дней). Исследована противоопухолевая активность производных 5-фторурацила (предоставленных Научно-технологическим центром органической и фармацевтической химии НАН РА) с использованием опухолевых и здоровых клеток легких человека. Два производных (С1 и С4) продемонстрировали более высокий уровень противоопухолевой активности по сравнению с 5-FU, а производные С6 и С7 проявили высокую активность образования свободных радикалов, что свидетельствует об их потенциале в качестве радиосенсибилизаторов (рук. к.б.н. Н.Бабаян).

Используя криоэлектронную структуру KCNQ1/KCNE3 с помощью моделирования молекулярной динамики (МД), обнаружено, что проникновение ионов калия становится возможным в условиях их частичной дегидратации. С помощью МД-моделирования, мутационного скрининга и измерений одиночных каналов обнаружено что, мутации G345 в узком участке полости могут нарушать поток ионов (рук. к.б.н. В.Варданян).

Описано течение заболевания, вызванного новым вариантом вируса африканской чумы свиней (АЧС) (Dilijan2011IMB, штамм Ковсакан), которое носит хронический, а в некоторых случаях бессимптомный характер. Охарактеризованы особенности клинических, патологических, иммунологических, вирусологических и генетических параметров развития новых, хронизированных форм заболевания. Хронизация АЧС может быть обусловлена менее выраженным иммунным ответом, а также снижением титров вируса в крови и тканях инфицированных свиней. Частичное секвенирование некоторых генов из мультигенного семейства (multigen family genes) вируса, ответственных за уклонение от иммунного ответа, выявило наличие мутаций, которые могли бы вызвать новое проявление заболевания (рук. д.б.н. З.Каралян).

Проведена инвентаризация старых и заброшенных виноградников Тавушской области, собрано около 170 различных генотипов, для которых созданы первичные паспортные данные, затем сорта подверглись фрагментному секвенированию с целью идентификации. Полученные генетические данные в настоящее время находятся на этапе анализа для уточнения количества сортов, клонов или мутантных форм, после чего новые сорта будут включены как в национальную, так и в международную базы данных (рук. к.б.н. К.Маргарян).

В рамках аналогового марсианского исследования "AMADEE-24" было показано, что в первые дни изоляции происходит резкое уменьшение длины теломер хромосом лейкоцитов, которое, однако, со временем восстанавливается. Таким образом, изоляция может привести к временному снижению активности иммунной системы, а модулирующие иммунную систему вмешательства на ранних стадиях могут снизить потенциальные риски для здоровья (рук. д.б.н. А.Аракелян).

### **3. Результаты, полученные по тематическому финансированию**

С помощью мышиной модели антифосфолипидного синдрома (АФС) продемонстрирован ряд патологических процессов, вызванных антифосфолипидными антителами, в плаценте с АФС. Наблюдаемые изменения в морфологии плаценты и профиле транскриптома предполагают связь между нарушениями беременности во время АФС и механизмами, лежащими в основе развития преэклампсии. Патологические изменения плаценты, вероятно, вызваны нарушением иммунной толерантности и нарушениями сосудообразования (рук. к.б.н. Г.Манукян).

Проведено моделирование молекулярной динамики продолжительностью в 2, 3 и 4 микросекунды для комплексов 14-3-3/пирин, 14-3-3/N и 14-3-3/p53 соответственно. Полученные траектории были проанализированы на предмет расстояний между сайтами связывания, анализа значений RMSD, свободной энергии взаимодействия с использованием расчетов ММ-(PB/GB)-SA и сравнений с рентгеновскими структурами (14-3-3 и целевой белковый пептид). Изучена роль белка 14-3-3 в сборке белков с внутренне неупорядоченными структурами (рук. д.б.н. К.Назарян).

На основе нанопорного секвенирования и машинного обучения разработан метод выявления транскриптомных подтипов хронического лимфолейкоза и прогнозирования течения заболевания (рук. д.б.н. А. Аракелян).

Исследование синхротронного рентгеновского излучения в разные дни парафинированных образцов головного мозга крыс показало, что облучение электронными пучками с ультракороткими электронными импульсами вызывает нарушения в нервных структурах и сосудистой системе головного мозга у животных (рук. к.б.н. Э. Аракелова).

На экспериментальной модели рассеянного склероза продемонстрирована важная роль провоспалительных цитокинов в патогенезе аллергического аутоиммунного энцефаломиелита, проявляющаяся активацией сфингомиелинового цикла и индукцией апоптотических процессов в нервных клетках. Применение ганглиозидсодержащего препарата привело к нормализации изученных параметров, что свидетельствует о его потенциальных нейропротекторных эффектах (рук. к.б.н. Г. Казарян).

В Национальной коллекции винограда РА завершена молекулярная идентификация и характеристика экономически значимых вирусов винограда. Картирована коллекция винограда и различные виноградарские регионы, где наблюдались вирусы GLRaV-1, GLRaV-3, GFLV, GVA, GVB, GFkV (рук. к.б.н. К.Маргарян).

Проведена оценка последствий длительного воздействия тяжелых металлов на окружающую среду среди населения горнодобывающих районов Армении. Описаны референтные концентрации химических элементов в армянской популяции, определены изменения в онкогенах и генах иммунного ответа в результате длительного воздействия металлов, проведена оценка генотоксического воздействия, проведено исследование эпигенетических изменений и окислительного стресса (рук. к.б.н. А.Степанян).

С помощью подхода виртуального скрининга, разработанного Лабораторией обнаружения противовирусных препаратов, обнаружены новые химические соединения, которые эффективно подавляют различные РНК и ДНК-вирусы, ингибируя ферментативную активность DNODH (рук. к.б.н. О.Закарян).

Изучены кристаллографические структуры белков нейраминидазы и эндонуклеазы вируса гриппа человека, лучшие из которых отобраны для компьютерного моделирования и скрининга. В результате скрининга составлен список химических соединений, противовирусная активность которых будет изучена в условиях *in vitro* (рук. к.б.н. О.Закарян).

Разработана новая технология, выявляющая молекулярные механизмы ответа бактерий на антибиотики. Выявлено прямое и косвенное воздействие антибиотиков, влияющих на рибосомный и не рибосомный механизмы, на трансляцию (рук. к.б.н. Л.Нерсисян).

Составлена база данных канцерогенных/неканцерогенных соединений, а также базы данных ген-экспрессии в раковых/здоровых тканях и под воздействием химических соединений. Выделены токсикофоры, ответственные за канцерогенную активность, и разработан подход для описания механизма действия этих токсикофоров и создания онтологии путей неблагоприятного исхода. Разработаны предварительные модели для гибридного *in silico/in vitro* прогнозирования канцерогенности соединений (рук. к.б.н. Н.Бабаян).

Проведено моделирование молекулярной динамики продолжительностью в 3 микросекунды для комплекса 14-3-3/N, полученные траектории проанализированы на основе RMSD, значений MM-(PB/GB)-SA, расстояний между сайтами связывания комплекса и сравнения с рентгеновской структурой комплекса 14-3-3/N-пептид (рук. Н.Мурадян).

Проведено полное секвенирование гена *MEFV* и оценка экспрессии генов инфламасомы в группах пациентов с семейной средиземноморской лихорадкой и здоровых людей. Предварительное исследование показало изменения в экспрессии генов *Casp1*, *MEFV*, *p65* во время ССЛ, что подтверждает существующие представления об активации пириновой инфламасомы при этом заболевании (рук. Л.Гукасян).

Проведено радиоуглеродное датирование ископаемых образцов, извлеченных из пещеры Ехегис-1. Костные останки были подвергнуты морфологической и молекулярной идентификации. Обнаружено 13 видов животных. Изучены микроскопические изменения в

ископаемой зубной эмали животных, оценено соотношение изотопов углерода и кислорода в эмали (рук. С.Мкртчян).

Осуществлена дискретная молекулярная динамика с обменом репликами (RX-πDMD) для комплексов белка 14-3-3σ с фосфорилированными пептидами, полученными из белков p53, пирина и нуклеокапсида SARS-CoV-2. Для каждого из комплексов была осуществлена RX-πDMD с использованием 32 реплик продолжительностью в 200 нс. каждая. С помощью алгоритма Ohm и на основании сайта взаимодействия с пептидом, предсказан аллостерический сайт взаимодействия лигандов для модуляции белок-белкового взаимодействия. Предсказанный аллостерический сайт взаимодействия также был подтвержден с помощью результатов RX-πDMD, которые показали, что данный сайт образуется только при взаимодействии 14-3-3 с белками партнерами или с выделенными из них фосфопептидами (рук. к.б.н. Г.Аракелов).

#### **4. Результаты прикладных разработок**

Разработаны модели для *in silico* прогнозирования параметров ADMET химических соединений. Все модели разработаны в соответствии с нормативными руководствами, включая ICH M7, REACH, ECHA-16-B-09 и OECD 37849783. Модели созданы с использованием как классических, так и современных алгоритмов машинного обучения и прошли валидацию. Эти модели применимы для исследовательских групп и лабораторий, занимающихся разработкой новых фармацевтических препаратов, изучением загрязнения окружающей среды, агрохимикатов или косметических соединений. Модели предоставляются бесплатно и являются альтернативой дорогостоящим коммерческим программам, ограниченный доступ к которым снижает качество научных исследований (рук. к.б.н. Н.Бабаян).

**Institute of Molecular Biology NAS RA**  
**Annual Report 2024**

## **1. Major achievements**

The first study of whole-genome sequences of modern and ancient DNA samples from the population of the Armenian highlands has refuted the theory of the Balkan origin of Armenians. The results obtained exclude the Assyrian origin of the Sassun people and show that the population of this mountainous region underwent a recent contraction in size, setting them apart from other territorial groups of Armenians. While checking for genetic continuity in the Armenian highlands, we found a genetic input into the region from a source linked to Neolithic Levantine farmers. It has been established that the populations from the eastern, western, and central parts of the Armenian highlands show a relatively high level of similarity, which indicates the general demographic history of geographically different groups of Armenians (Sup.: DSc(biol.) L. Yepiskoposyan).

## **2. Outcomes of Applied Developments**

Models have been developed for the *in silico* prediction of the ADMET parameters of chemical compounds. All models were developed following regulatory guidelines, including ICH M7, REACH, ECHA-16-B-09, and OECD 37849783. The models were built using both conventional and advanced machine learning algorithms and have been validated. These models are applicable to research groups and laboratories focused on the development of new pharmaceuticals, environmental pollution studies, agrochemicals, or cosmetic compounds. These models are freely available and serve as an alternative to expensive commercial software, limited access to which can hinder the quality of research efforts (Sup.: cand(biol.) N. Babayan).