

ПРАКТИЧЕСКИЙ ПРИМЕР

# Reaxys<sup>®</sup> Reaxys Medicinal Chemistry Pathway Studio<sup>®</sup>

Российский университет дружбы народов реализует потенциал в мультидисциплинарных исследованиях с использованием решений Elsevier Life Sciences.



## НОВЫЕ ГОРИЗОНТЫ ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ ДЛЯ РЕШЕНИЯ АМБИЦИОЗНЫХ ЗАДАЧ ЗАВТРАШНЕГО ДНЯ

Один ведущих университетов Российской Федерации открывает новые лаборатории и использует возможности, предоставляемые инструментами Reaxys, Reaxys Medicinal Chemistry и Pathway Studio для того, чтобы помочь исследователям решать мультидисциплинарные задачи в области Химии, Биологии и Фармакологии.

**Все более междисциплинарный характер химических исследований ставит новые задачи перед мировым исследовательским сообществом. Ученые должны собирать информацию по все большему спектру тем, сотрудничать за пределами выбранных ими областей и оставаться в курсе более широкого круга вопросов, чем когда-либо прежде.**

“Новые вызовы, новые приоритеты в постоянно меняющейся социальной среде требуют от нас совершенно новой организации как учебного процесса, так и науки. Чтобы соответствовать высочайшим критериям ведущих мировых университетов, такие университеты, как РУДН просто обязаны «ставить учебный процесс на научно-исследовательские рельсы»

Леонид Геннадьевич Воскресенский  
Профессор РАН, декан факультета физико-математических и естественных наук  
РУДН

Леонид Геннадьевич Воскресенский, Профессор РАН, декан факультета РУДН рассказывает, как РУДН превращает вызовы в возможности, открывая новые лаборатории и используя возможности, предоставляемые инструментами **Reaxys, Reaxys Medicinal Chemistry and Pathway Studio**, чтобы помочь исследователям решать мультидисциплинарные задачи в области Химии, Биологии, Медицины и Фармакологии. Стратегия привела к развитию новых направлений и повышению качества процесса НИОКР в таких областях, как исследование биологических моделей заболеваний *in silico* для поиска перспективных мишеней, исследование биологической активности синтезированных классов соединений *in silico* по отношению ко всем известным мишеням, предсказание потенциальной фармакологической активности новых соединений, репрофилирование или репозиция препаратов и синтез новых веществ против социально значимых заболеваний. “В декабре 2017 г. мы торжественно открыли четыре новые химические лаборатории внутри Объединенного института химических исследований РУДН. Эти лаборатории созданы в рамках Программы повышения конкурентоспособности ведущих университетов Российской Федерации среди ведущих мировых научно-образовательных центров «5-100» и призваны поднять химическую науку в РУДН на качественно новый уровень. Каждая из лабораторий входит в состав одного из Научных центров Объединенного института химических исследований, которыми руководят приглашенные ученые с мировым именем. Направления исследований,

проводимых в этих научных центрах, разнообразны – от тонкого органического синтеза до изучения свойств композиционных и керамических материалов. Все лаборатории оснащены современным химическим оборудованием – ЯМР-, ИК- и УФ-спектрометрами, хроматографами, новейшими микроволновыми печами, роторными испарителями и др. и имеют от шести до восьми мощных вытяжных шкафов. Мы организуем до шестнадцати новых мест в каждой лаборатории для проведения научно-исследовательской работы. Благодаря новым открываемым экспериментальным возможностям сотрудниками и студентами РУДН будут получены интересные и важные научные результаты в таких областях химии как катализ, химия природных соединений и их синтетических аналогов, фармацевтическая химия, супрамолекулярная химия и химия наноматериалов.

#### **Доступ к высококачественной информации имеет важное значение**

В своих научных изысканиях мы пользуемся различными источниками научной информации, последние несколько лет конечно-же это в основном он-лайн источники, такие как Reaxys, SciFinder, для решения наукометрических задач широко используется Scopus и WoS. РУДН имеет подписку на все публикации Американского химического общества, журналы издательств Wiley, Springer и др. В основном доступ осуществляется с компьютеров внутренней сети РУДН. В магистратурах “Фундаментальная и прикладная химия” и “Фарманализ” у нас предусмотрен спецкурс по использованию различных источников он-лайн информации для химиков.



Профессор Воскресенский со своей научной группой

Для поддержания эффективности исследований мы активно используем **Reaxys** и **Reaxys Medicinal Chemistry**. С помощью этих платформ возможно эффективно решать различные задачи, начиная от поиска методов синтеза конкретных соединений до определения белка-мишени для биологического скрининга. Лично мне эти ресурсы помогли написать заявки и выиграть 2 международных гранта РФФИ. Один из этих проектов посвящен изучению мультикомпонентных реакций (МКР) в условиях катализа наноразмерными катализаторами.

МКР вообще и реакции с использованием изоцианидов (МКРИ) в частности, представляют собой удобный подход к получению разнообразных полизамещенных структур, в том числе и пептидомиметиков. МКРИ - это высокопроизводительный метод для комбинаторного синтеза библиотек соединений для биологического скрининга, позволяющий, контролируя «матрицу» используемых реагентов, однозначно контролировать разнообразие конечных продуктов. МКРИ характеризуются широкой областью применения в отношении пространства доступных реагентов, что повышает «процент успеха» в реализации комбинаторных синтетических подходов. Указанные факторы предопределяют востребованность этих реакций и достаточно большое число публикаций по этой тематике. Использование Reaxys позволило оперативно провести анализ публикаций и определить круг ученых, работающих в данной области, а затем и выбрать конкретного коллаборатора для подачи заявки на совместный грант. Проект еще не закончен, по прошествии года работы получены интересные результаты, позволяющие с оптимизмом смотреть на возможность их скорейшей публикации в высокорейтинговых журналах, а также получен ценный опыт совместной работы с коллегами из другой страны. Параллельно мы задумываемся о подаче заявок на другие гранты, в том числе по междисциплинарным областям науки.

Охват все более междисциплинарного характера исследований будет способствовать продвижению к уровню ведущих мировых научно-исследовательских институтов в области химии и в других областях. Принимая международное сотрудничество, мы будем продолжать работать в передовой области химических исследований.

**Леонид Геннадьевич Воскресенский, декан факультета физико-математических и естественных наук РУДН**

Д.х.н. Леонид Геннадьевич Воскресенский - профессор РАН, декан факультета физико-математических и естественных наук РУДН, заведующий кафедрой органической химии. Он отвечает за все образовательные программы факультета, прием пост-дочков и аспирантов, а также за улучшение репутации РУДН в зоне своей ответственности (Химия, Математика, Физика, Информатика). Приглашенный лектор в университетах Гента (Бельгия), Дюссельдорфа, Гиссена (Германия), Лафборо (Великобритания). Зам. главного редактора журнала "Химия Гетероциклических Соединений". Проф. Воскресенский - автор более 100 статей в различных высокорейтинговых журналах. Область научных интересов включает химию гетероциклических соединений, домино и мультикомпонентные реакции.

