

# СЪБИТИЕТО Е ПОД ПАТРОНАЖА НА ПРЕЗИДЕНТА НА РЕПУБЛИКА БЪЛГАРИЯ Г-Н РУМЕН РАДЕВ

40 ГОДИНИ

**ЛАБОРАТОРИЯ ПО МАТЕМАТИЧНА ХИМИЯ**

УНИВЕРСИТЕТ „ПРОФ. Д-Р АСЕН ЗЛАТАРОВ“

БУРГАС

---

ЛАБОРАТОРИЯТА,  
КОЯТО ПРЕВЪРНА ТЕОРЕТИЧНАТА ХИМИЯ  
В ПРОИЗВОДИТЕЛНА СИЛА

---

40 ГОДИНИ

**ЛАБОРАТОРИЯ ПО МАТЕМАТИЧНА ХИМИЯ**

УНИВЕРСИТЕТ „ПРОФ. Д-Р АСЕН ЗЛАТАРОВ“

БУРГАС

---

ЛАБОРАТОРИЯТА,  
КОЯТО ПРЕВЪРНА ТЕОРЕТИЧНАТА ХИМИЯ  
В ПРОИЗВОДИТЕЛНА СИЛА

---

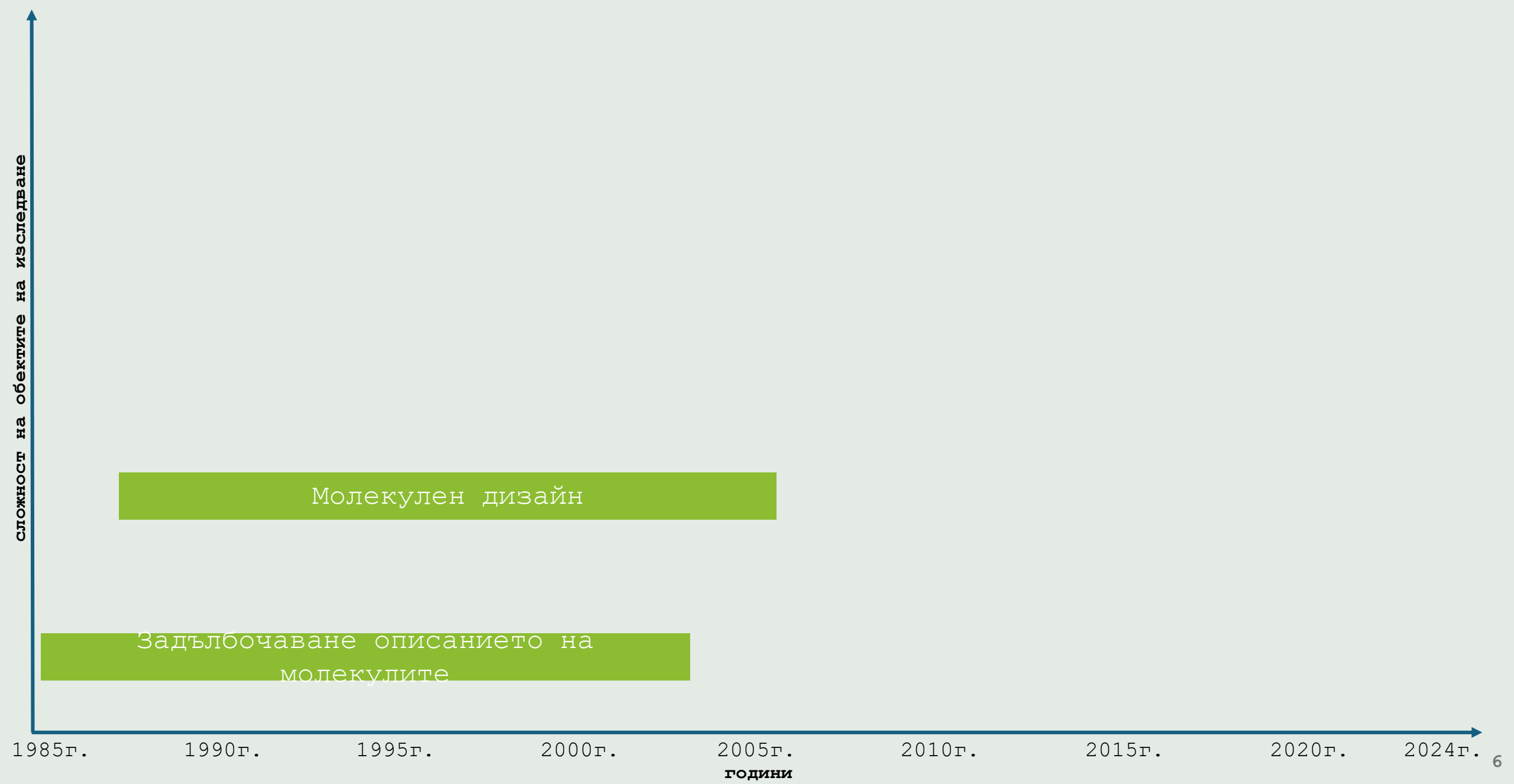
Част 1:  
ЕВОЛЮЦИЯТА НА  
ЛАБОРАТОРИЯТА ПРЕЗ  
ГОДИНИТЕ

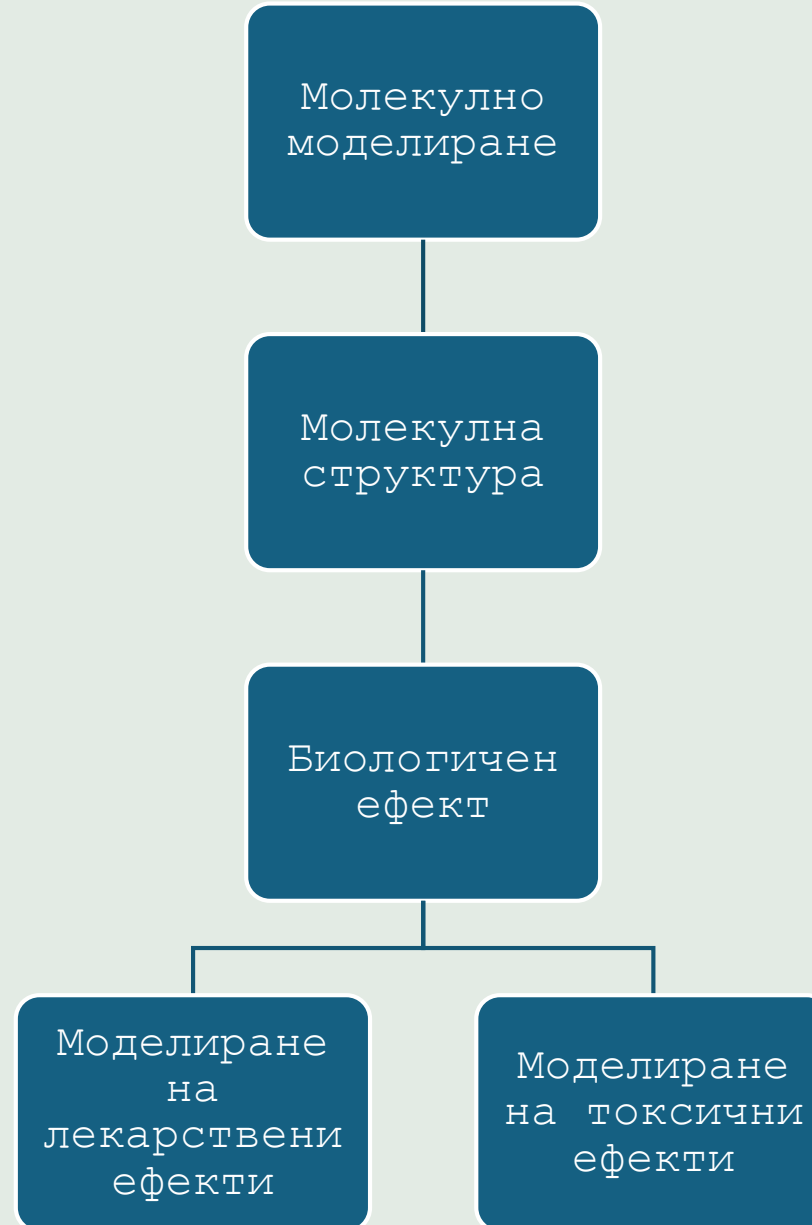
Еволюция в научните  
направления

Еволюция на  
моделираните  
токсични ефекти

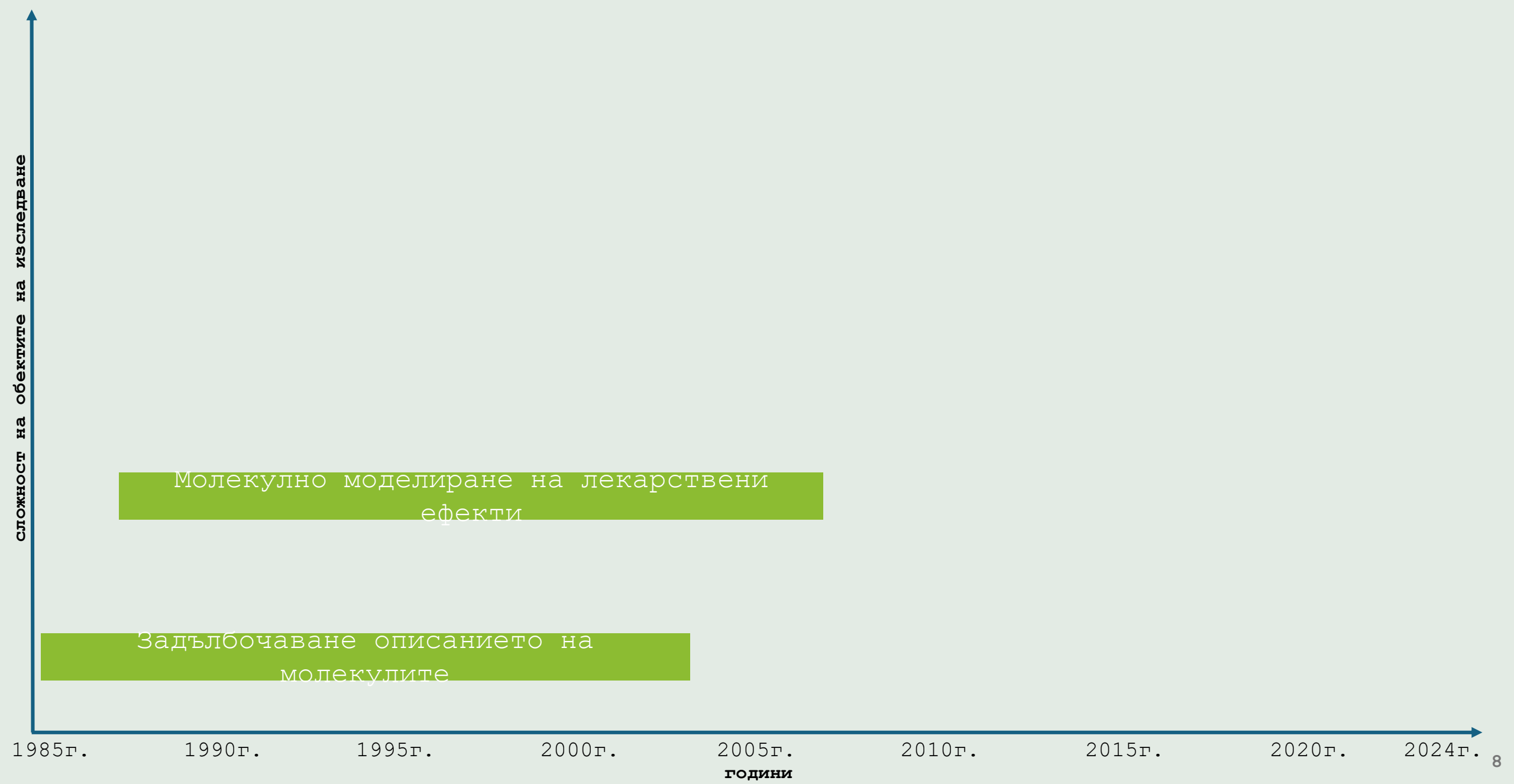
Преход в характера на  
научноизследователска  
та работа

Промяна характера на  
потребителите





# Лабораторията през годините – еволюция в научните направления



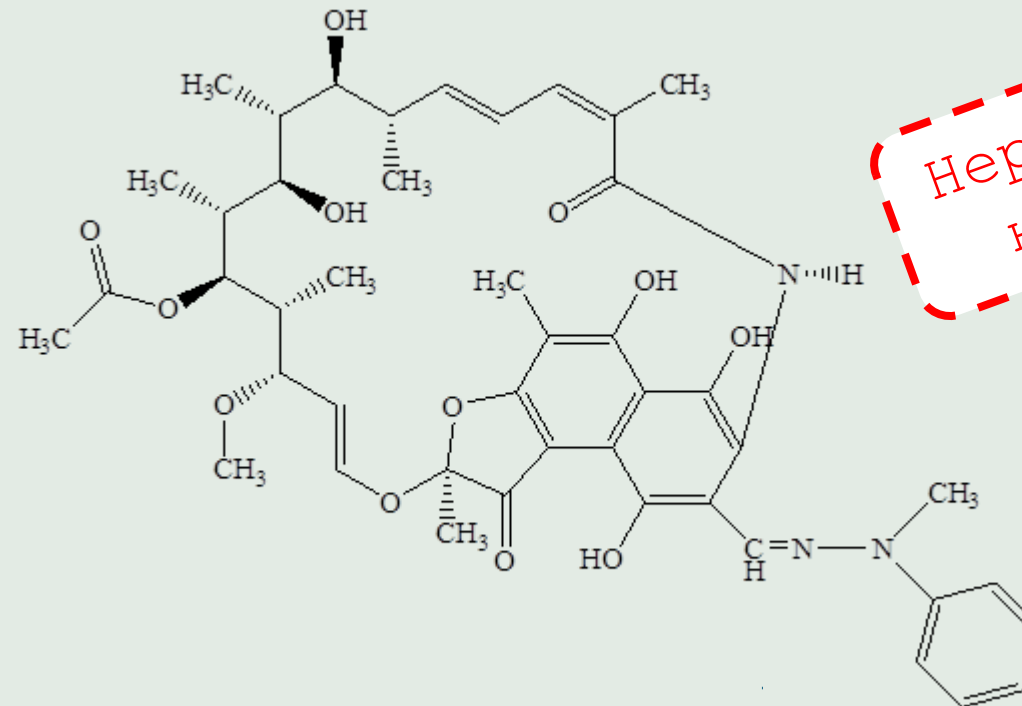
## Молекулно моделиране на лекарствени препарати





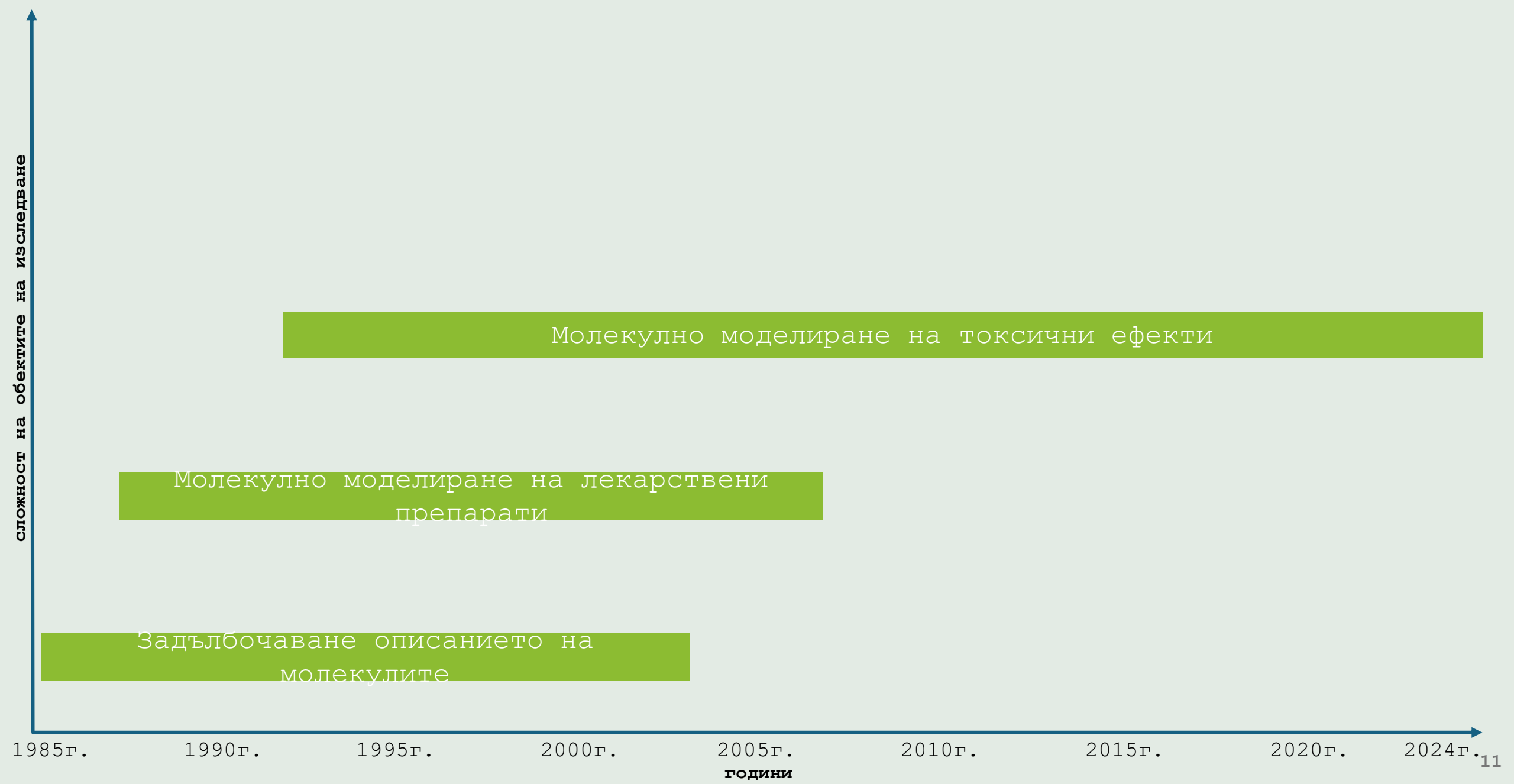
## Молекулно моделиране на лекарствени препарати

### Нов анти tubеркулозен препарат



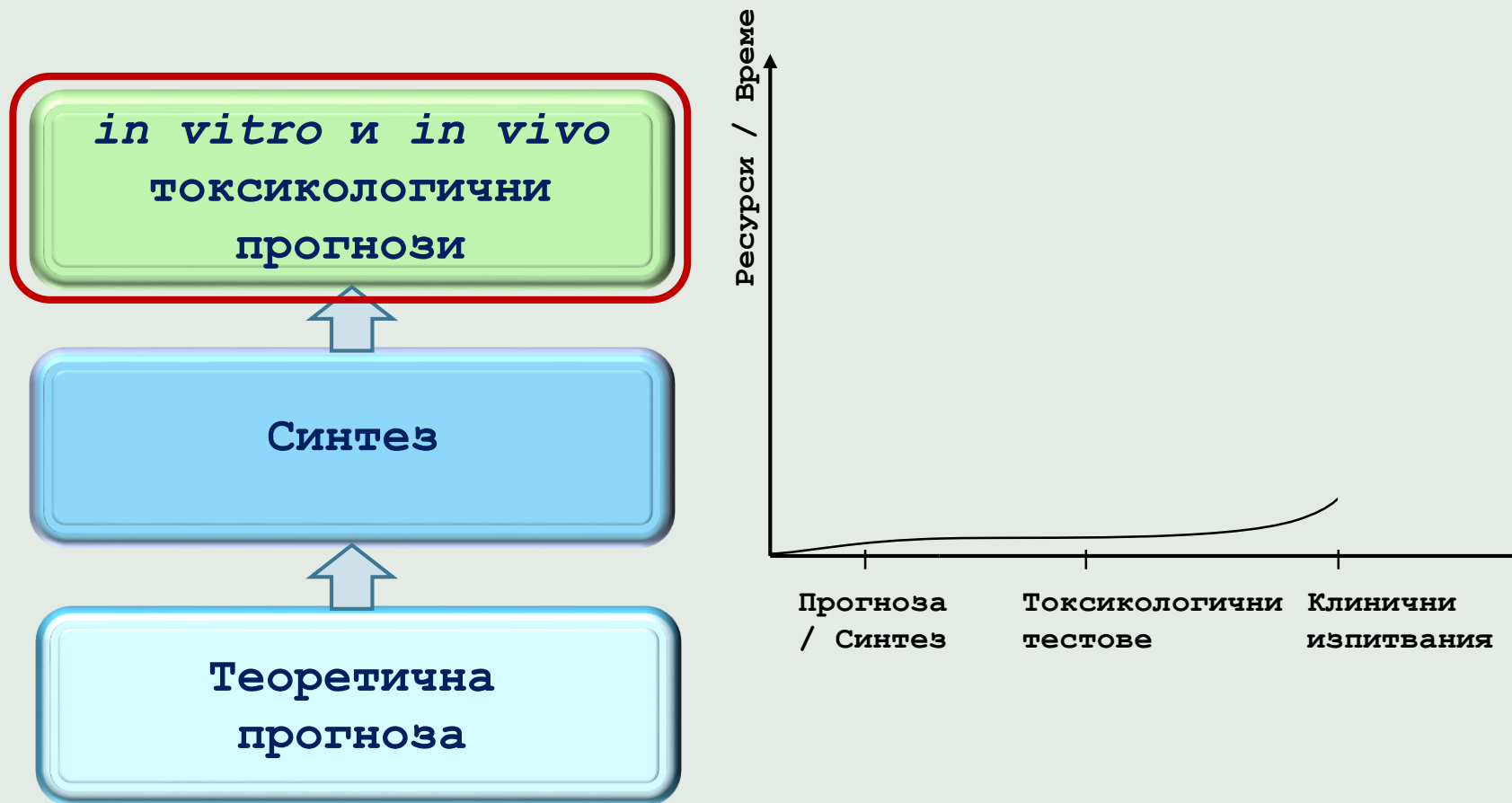
Нереализиран проект

**QSAR Modeling of antimycobacterial activity and activity against other bacteria of 3-formyl rifamycin SV derivatives.** - Dimov, D., Nedyalkova, Z., Haladjova, S., Schüürmann G., Mekenyan, O., Quantitative Structure-Activity Relationships, 2001, 20(4), 298-318

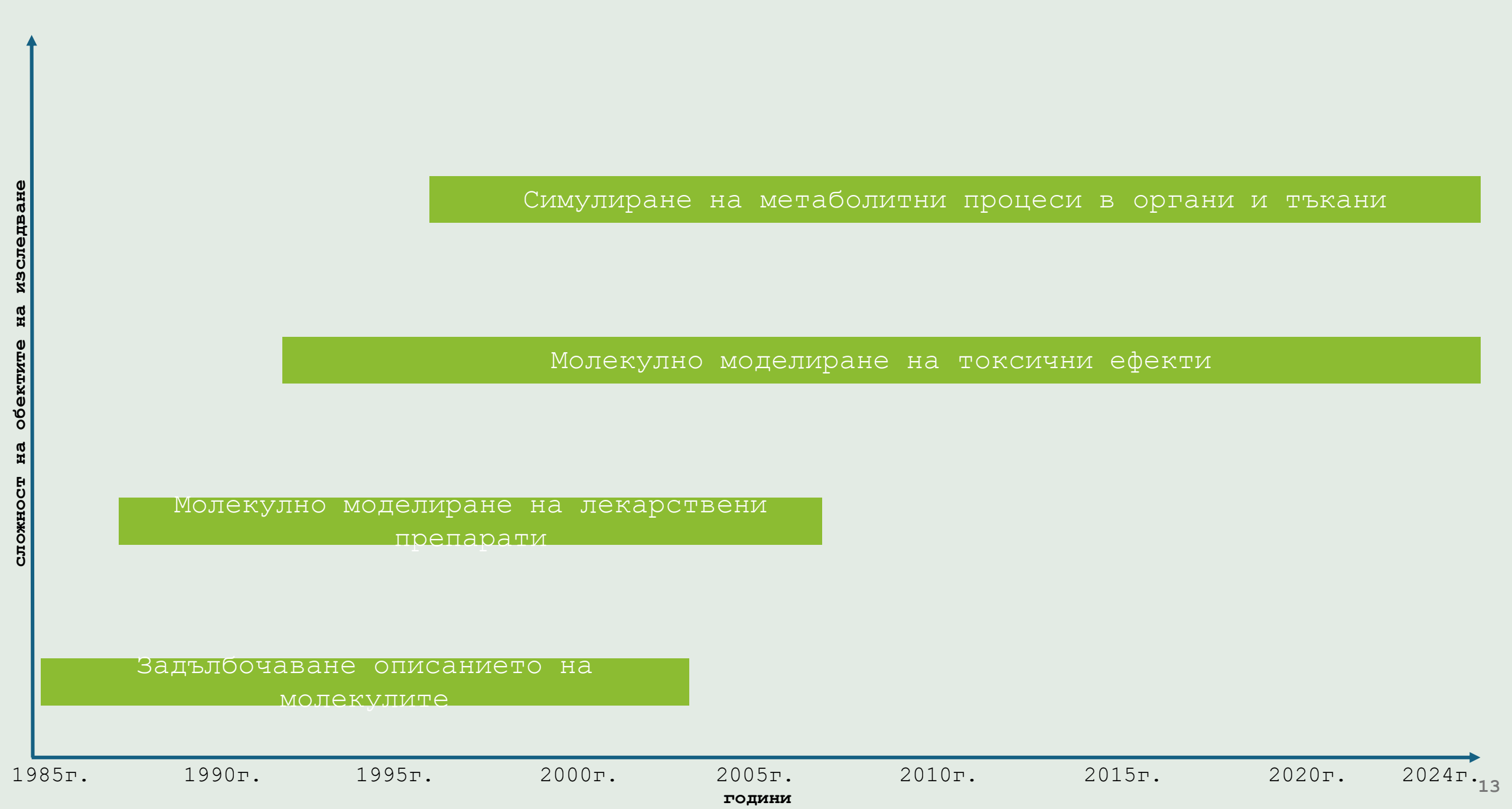


# Молекулно моделиране – предсказване на токсичност

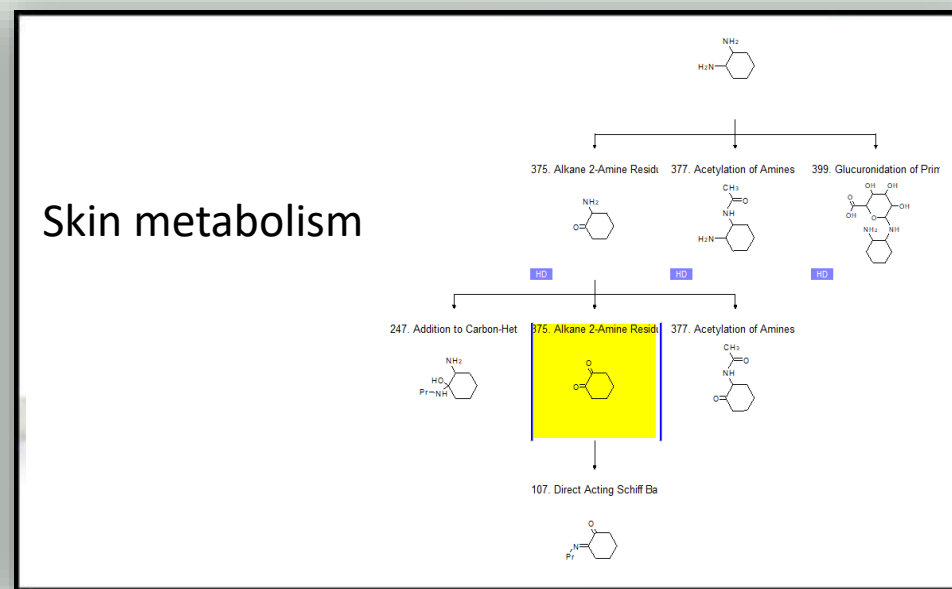
Приложимо от регулаторни органи и индустрия



# Лабораторията през годините – еволюция в научните направления

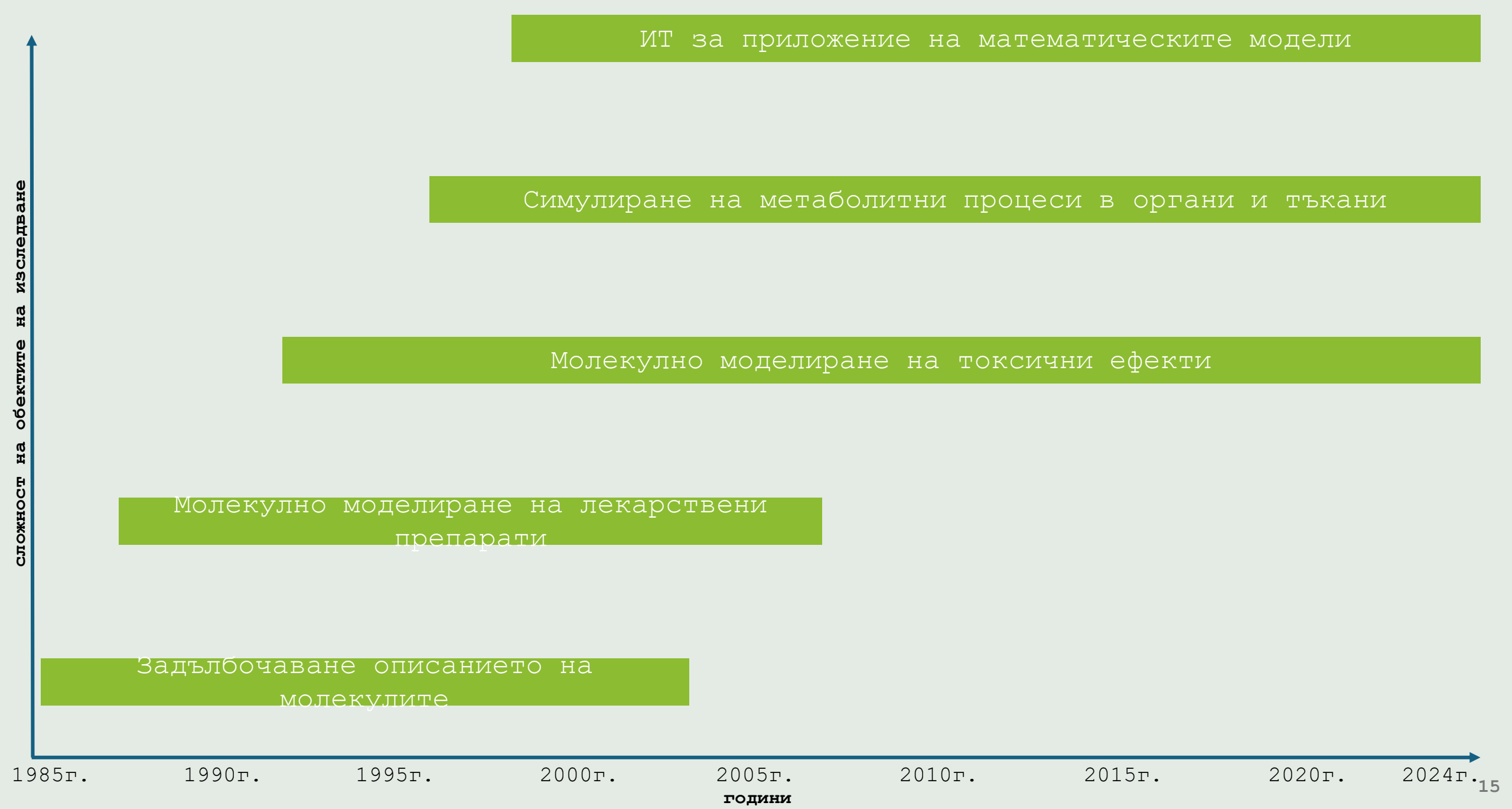


## Симулиране на метаболитни процеси в органи и тъкани



Прогнозиране на метаболизъм в кожата и идентифициране на токсични метаболити

# Лабораторията през годините – еволюция в научните направления



сложност на обектите на изследване

1985г. 1990г. 1995г. 2000г. 2005г. 2010г. 2015г. 2020г. 2024г.

години

## Симулиране на метаболитни процеси в органи и тъкани

**In silico симулиране на метаболизъм**

**Skin metabolism**

375. Alkane 2-Amine Resid. 377. Acetylation of Amines 399. Glucuronidation of Prim

247. Addition to Carbon-Het 375. Alkane 2-Amine Resid. 377. Acetylation of Amines

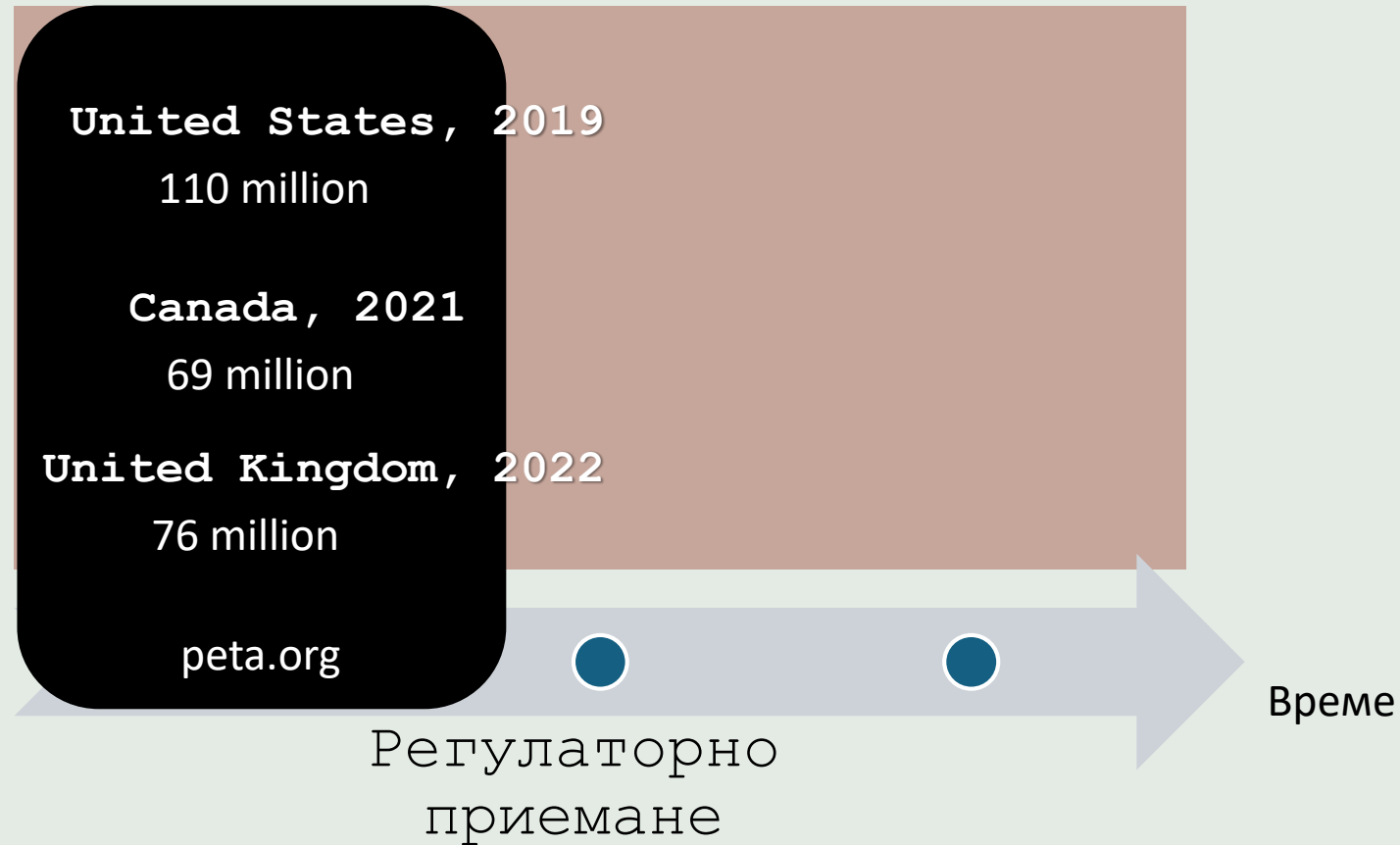
107. Direct Acting Schiff Ba

Прогнозиране на метаболизъм в кожата и идентифициране на токсични метаболити

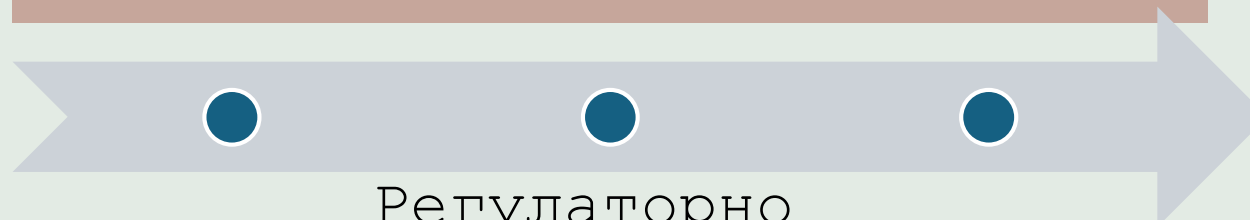
Приложение на основното  
научно направление  
*Предсказателната*  
*ТОКСИКОЛОГИЯ*



Употреба на значителен брой експериментални животни



Разработване на *in vitro* тестове



Време

Регулаторно  
приемане

Приложение на компютърни модели





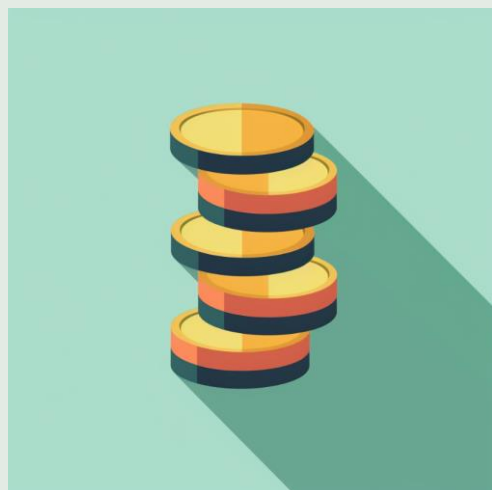
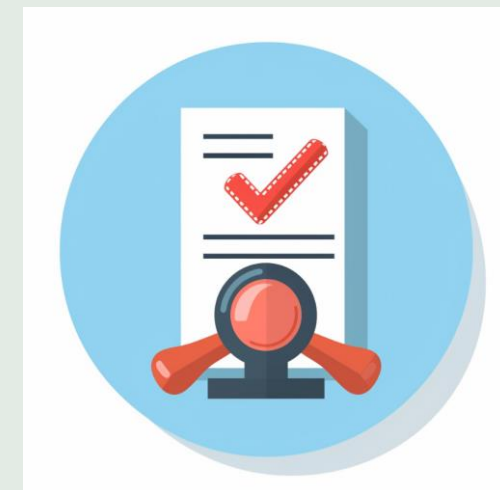
Алтернативен метод за заместване на тестовете върху



Позволява регулаторно приемане



Спестяване на средства

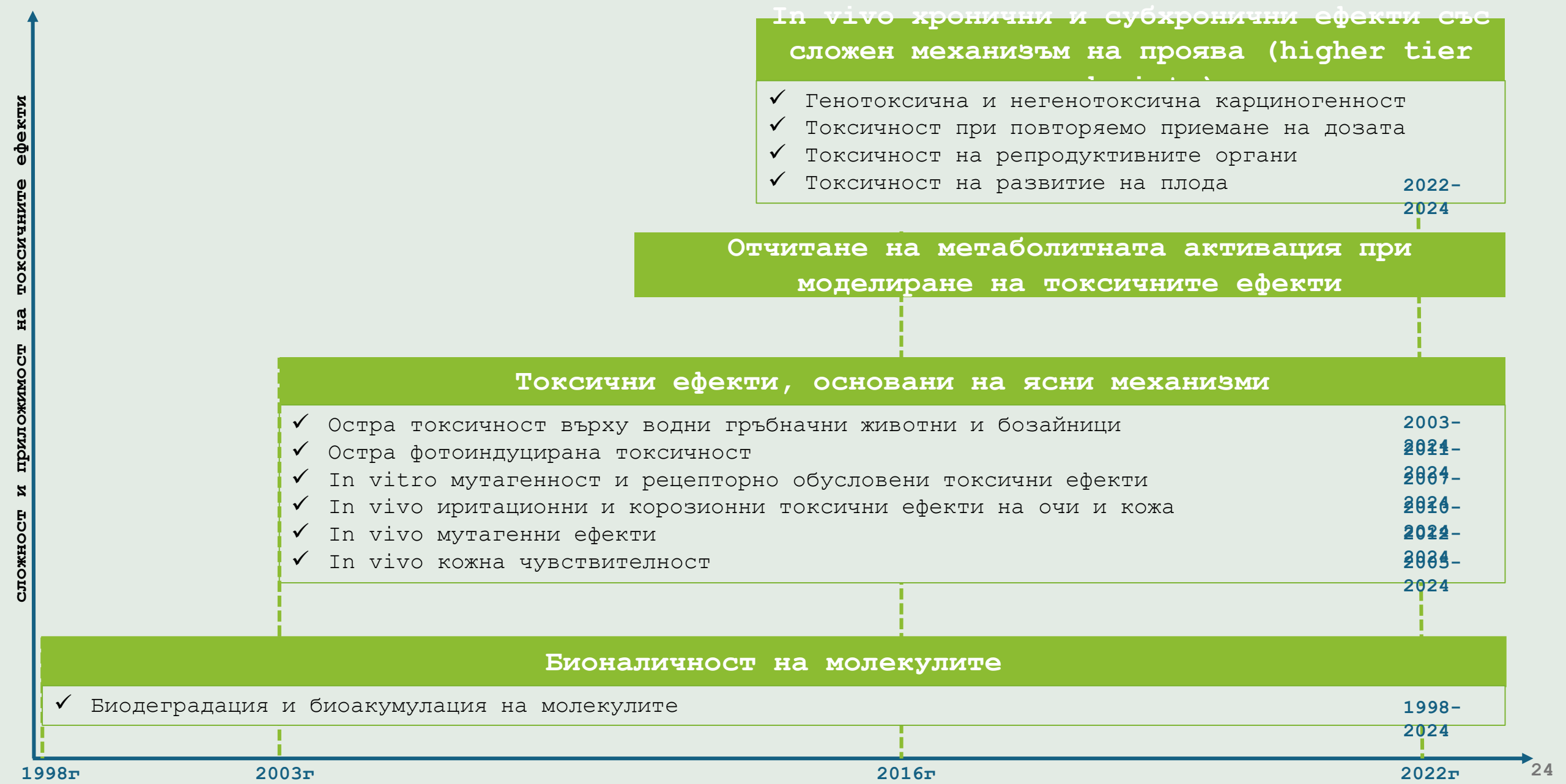


Еволюция в научните  
направления

Еволюция на  
моделираните  
токсични ефекти

Преход в характера на  
научноизследователска  
та работа

Промяна характера на  
потребителите



Еволюция в научните  
направления

Еволюция на  
моделираните  
токсични ефекти

Преход в характера на  
научноизследователска  
та работа

Промяна характера на  
потребителите

1975г.

1985г.

2024г.

Академично ниво

Академично и приложно ниво

● Изграждане на стабилна академична наука

● Оповестяване на получените научни резултати

Внедряване на науката в практически инструменти ●

Маркетинг на практическите инструменти ●

Покриване на разходите и генериране на придадена стойност ●



Еволюция в научните  
направления

Еволюция на  
моделираните  
токсични ефекти

Преход в характера на  
научноизследователска  
та работа

Промяна характера на  
потребителите

Академична  
наука

в България

1984 –  
1990г.  
**БАН,**  
**КЦИИТ**  
София

Приложна  
наука

в България

1990 – 1994г.  
**ФАРМАЦИЯ АД**  
Дупница

1991 – 1996г.  
**АНТИБИОТИК АД**  
Разград

1993 – 1998г.  
**НИХФИ АД**  
София

1996 – 1998г.  
**НЕФТОХИМ ЕАД**  
Бургас

Приложна  
наука

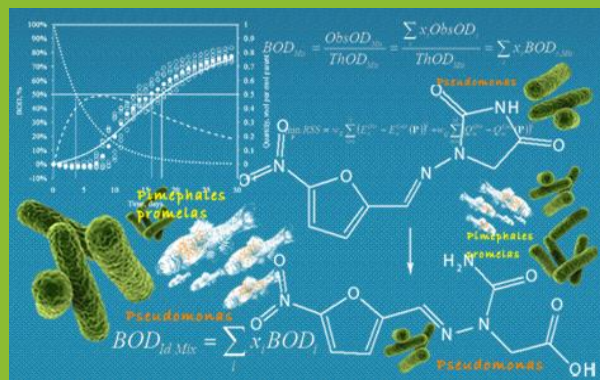
извън България

**Регулаторните агенции** на Северна  
Америка, Европа, Азия, Австралия

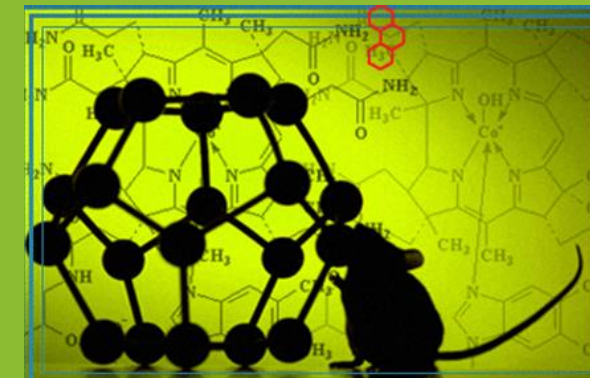
**Химични и козметични предприятия** от  
Северна Америка, Европа, Азия

Част 2:  
ЛАБОРАТОРИЯТА ДНЕС

Частни  
софтуерни  
платформи



**CATALOGIC** платформата прогнозира биодegradацията, биоаккумуляцията и токсичните ефекти на химичните съединения към различни водни организми.



**TIMES** платформата прогнозира токсични ефекти, въздействащи върху човека, като симулира метаболизма на химичните съединения и взаимодействието им с макромолекулите

Частни  
софтуерни  
платформи



Публични  
софтуерни  
платформи



# QSAR TOOLBOX

Единна система за оценка въздействието върху природата и живите организми.



**OECD** – Организация за икономическо сътрудничество и развитие (ОИСР)

**ЕЧА** – Европейска химическа агенция

## QSAR TOOLBOX

Ръст на потребителските регистрации





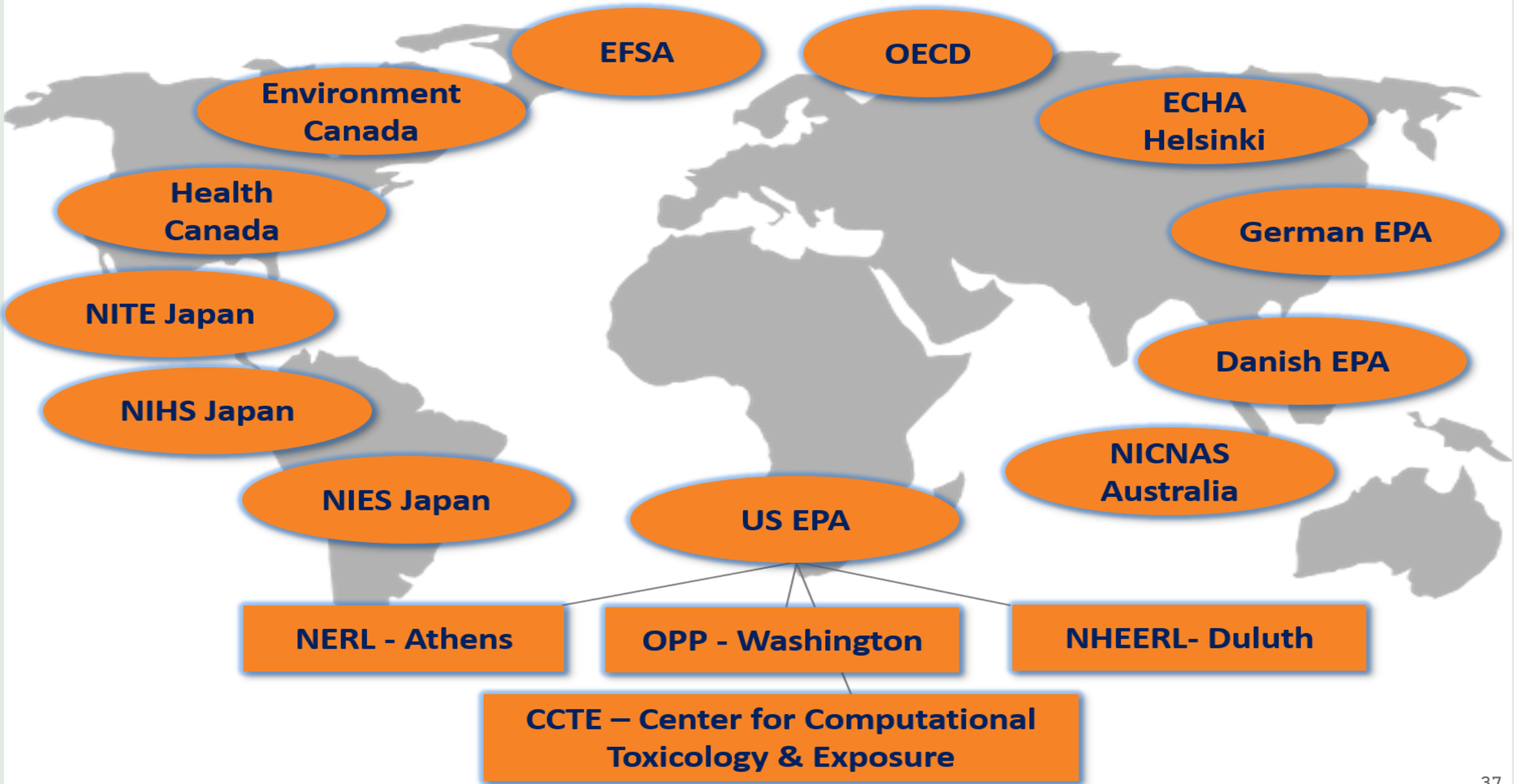


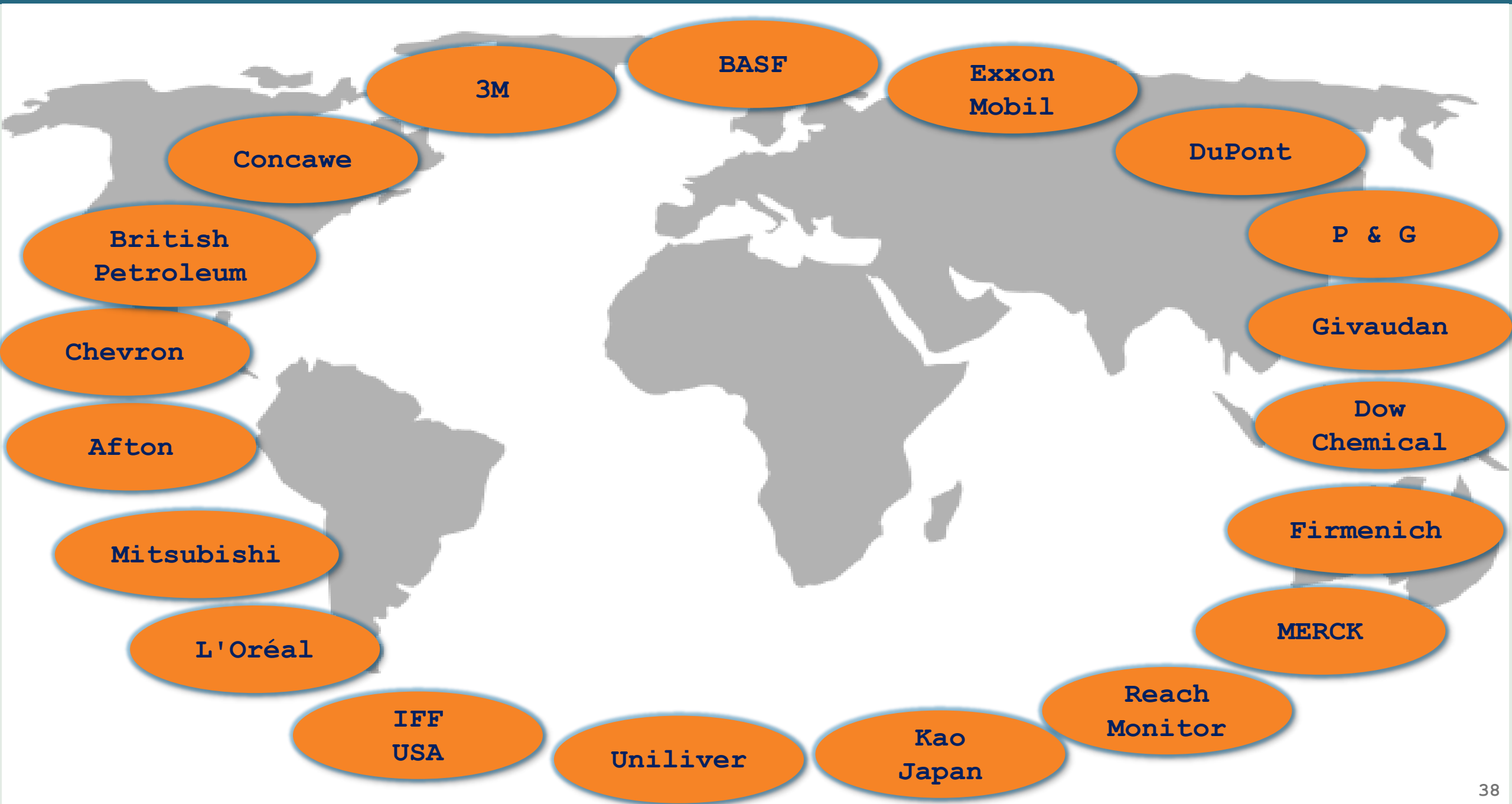
Частни  
софтуерни  
платформи



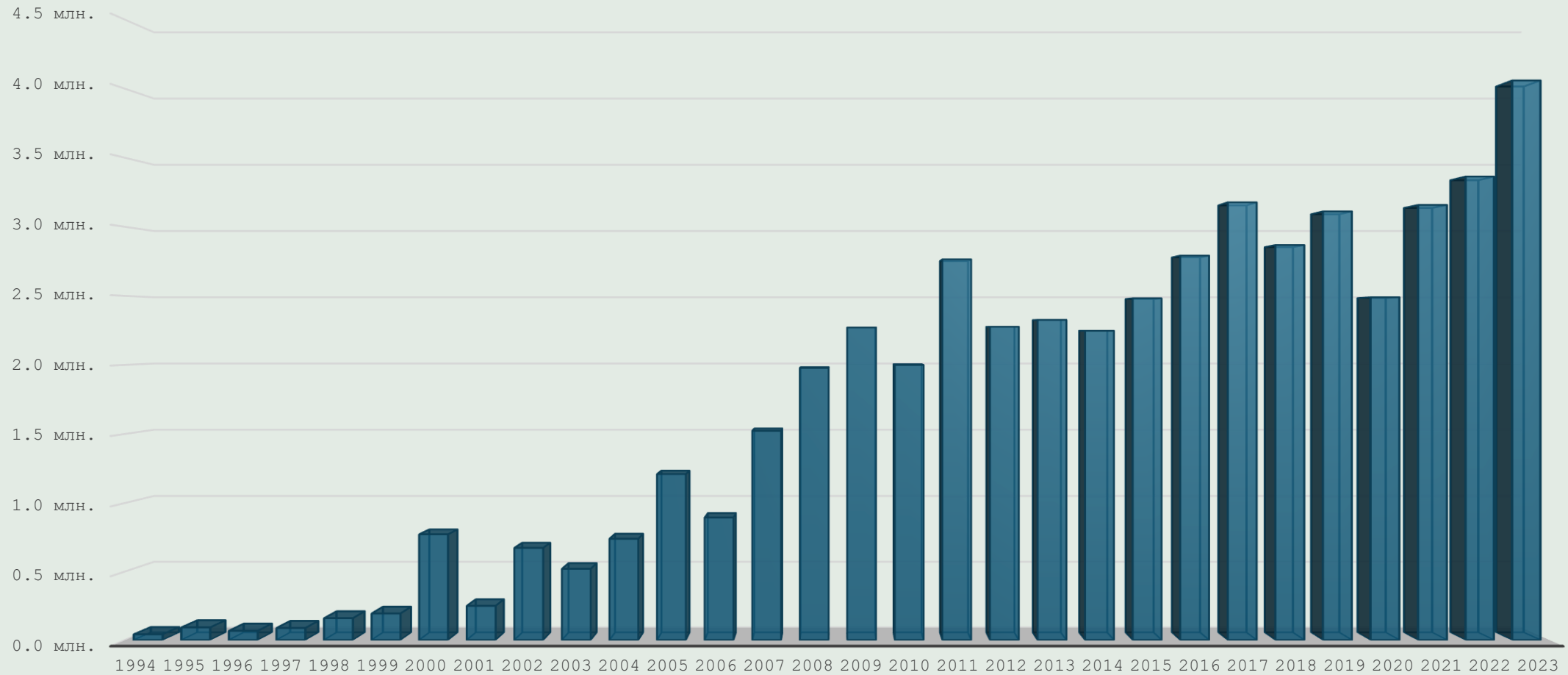
Публични  
софтуерни  
платформи







### Годишни приходи



Модел за изграждане на  
ефективна наука, приложен  
в ЛМХ

## ПРОФЕСИОНАЛНА НАУКА

### АКАДЕМИЧНА НАУКА

**Стъпка 1.** Изграждане на стабилна академична наука – изисква инвестиции в значителни ресурси

**Стъпка 2.** Оповестяване на получените научни резултати – издания, публикации, патенти

### ПРИЛОЖНА НАУКА

**Стъпка 3.** Внедряване на науката в практически инструменти – например софтуер, технологии

**Стъпка 4.** Маркетинг на практическите инструменти – софтуер, проекти, технологии

**Стъпка 5.** Покриване на разходите и генериране на **ПРИДАДЕНА СТОЙНОСТ**

**Стъпка 6.** Връщане в Стъпка 1 и **РЕ-ИНВЕСТИРАНЕ** на придадената стойност

## ПРОФЕСИОНАЛНАТА НАУКА

1

- Създава принадлежна стойност

2

- Има рефинансиращ характер

3

- Осигурява устойчива научна дейност

Възможно ли е развитието  
на науката като  
производствена сила в  
България?



## За това са необходими:

### Академична

#### активност

Наличие на интелектуален и научен потенциал



Първоначално субсидиране – чрез бюджетно финансиране



Постижения в академичната наука



Създаване на научен колектив/Сътрудничество с водещи академични институции



### Приложна активност

Запознаване със специфичните нужди на стопанските организации



Фокусиране науката в тесни области, нужни на стопанските организации



Предлагане на конкурентноспособни научни решения



Ефективно използване на финансови и интелектуални ресурси



Част 3:  
БЪДЕЩИ СЪПКИ

Развитие на OASIS моделите за симулиране термодинамиката и кинетиката на метаболитните трансформации на химичните съединения.

Развитие на моделите за прогнозиране на сложни *in-vivo* ефекти (канцерогенност, токсичност на репродуктивни органи, токсичност на развитие на плода).

Участие в общата система на Европа за токсикологична оценка на химичните съединения.

## Признание в България



Голямата награда **ПИТАГОР**  
София, 2012г.



Връчване на почетно звание „Доктор Хонорис Кауза“  
Бургас, 2023г.



## Признание в България



Проф. Ованес Мекенян – **почетен гражданин на Бургас**  
Бургас, 2009г.

Признание по света



Наградата **LUSH**  
Лондон, 2014г.



Награда за цялостен принос в **QSAR**  
2021г.

## Благодарности на:

Семейството – за търпимостта

Административните и академични ръководства на университета

Административните ръководители на гр. Бургас

Преподавателите на у-т „Проф. д-р Асен Златаров“ и особено на моя ръководител – проф. Бончев – морал и академична етика

Личния състав на ЛМХ

