

ТВОРЧЕСКА АВТОБИОГРАФИЯ

Име	Ирини Атанас Дойчинова - Цекова
Служебен адрес	Фармацевтичен факултет, катедра „Химия”, ул. „Дунав”2, 1000 София
Образование	
1981 – 1986	Висш медицински институт – София (сега Медицински университет – София) Специалност: фармация
1987 – 1992	Висш медицински институт – София Фармацевтичен факултет, катедра „Химия” Кандидат на науките (сега ОНС „Доктор“) Дисертация на тема: Компютъризиран лекарствен дизайн на вещества, активни върху A1 и A2 аденозинови рецептори Научен ръководител: проф. Димитрия Михайлова, дфн Научен консултант: гл. ас. Румяна Начева, кфн Специализиран научен съвет по органична химия и органична технология при Висшата атестационна комисия Рецензенти: проф. д-р Петър Узунов, дбн, ст.н.с. Хозе Канети, кхн. Защита: 7.06.1993 г.
1995 – 1997	Медицински университет – София Фармацевтичен факултет СДО „Клинична фармация“
2000 – 2003	Edward Jenner Institute for Vaccine Research, UK Имуноинформатика Senior Research Scientist
2004 – 2005	Гостуващ учен
2006	Jenner Institute, Oxford University, UK Имуноинформатика Гостуващ учен
2008	Медицински университет – София НС „Доктор на науките“ (БАК) Дисертация на тема: In silico изследване на пептиди-епитопи на Т-лимфоцитите Специализиран научен съвет по теоретична и изчислителна химия при Висшата атестационна комисия. Рецензенти: проф. д-р Маргарита Караиванова, дмн, ст.н.с. I ст. д-р Станимир Кюркчиев, дмн, ст.н.с. II ст. Илза Пъжева, дбн. Защита: 25.06.2008 г.

Трудов стаж

1986 – 1987	Химико-технологичен комбинат, гр. Станке Димитров Технолог
1992 –	Висш медицински институт – София от 1995 г. Медицински университет – София Фармацевтичен факултет, катедра „Химия”
1993 – 1995	Фармацевт
1995 – 2007	Асистент, Старши асистент, Главен асистент
2007 – 2010	Доцент (БАК)
2010 –	Професор (БАК) Лектор в учебните дисциплини „Физикохимия с колоидна химия“ и „Биофармация и фармакокинетика“
2016 – 2021	Зам.-декан по акредитациите, атестирането и тръжните документи
2016 –	Ръководител на катедра „Химия“
2021 –	Член на Комисията по академична етика към МОН

Награди

2011	Награда „Златна Панацея“ за особени приноси при реализацията на преподаването, научноизследователската и експертна дейност в медико-биологична дейност. Медицински университет - София
2016	Награда „Питагор“ за утвърден учен в областта на медицинските науки. Министерство на образованието и науката
2020 – 2022	В първия 1% на най-цитираните учени в направление „Фармация и фармакология“, съгласно класацията на Ioannidis et al. за 2020,2021 и 2022 г.

Научни интереси

Лекарствен дизайн, имуноинформатика, молекулно моделиране

Научни постижения

Създател и ръководител на Лабораторията по лекарствен дизайн и биоинформатика, Фармацевтичен ф-т, МУ-София

<https://www.ddg-pharmfac.net>

Автор и съавтор на:

- 159 научни публикации, от които 122 публикации в списания с IF (общ IF 386.284); от които 33 през последните 5 години (30 в списания с IF)

- 16 глави в монографии, от които 4 през последните 5 години

- 8 учебника и 1 учебно помагало, от които 2 през последните 5 години

Цитиранията на научните ми трудове (без самоцитирания) към м.май 2024 г. са:

- по Scopus – 6869, от които 3832 за последните 5 години, h-индекс: 34
- по Web of Science – 6271, от които 3338 за последните 5 години, h-индекс: 31
- по Google Scholar – 10 248, от които 5237 за последните 5 години, h-индекс: 41

Ръководител на пет европейски и един национален проекти, ръководител на екипа от МУ-София, участващ в Центъра за върхови постижения по информатика и ИКТ и в Националния център за високопроизводителни и разпределени пресмятания, ръководител на научна група от МУ-София към проект „Създаване на мрежа от изследователски висши училища“, Фонд „Научни изследвания, МОН, по Националния план за възстановяване и устойчивост.

Финансови резултати: привлечени над 3 252 857 лв., от които 1 262 468 лв. от европейски проекти, 3 132 857 лв. за последните 5 години.

Ръководител на шест успешно защитили докторанти, ръководител на докторските програми „Теоретична химия“ и „Фармацевтична биоинформатика“

По-важни научни постижения в областта на лекарствения дизайн:

- В колаборация със синтетици от България, Гърция, Италия и Великобритания са проведени редица 2D и 3D QSAR анализи на различни серии съединения, довели до създаването на съединения с по-висок афинитет и селективност. Някои от резултатите са сред най-цитираните публикации на проф. Дойчинова.
- Чрез молекулна динамика е симулиран процеса на първична нуклеация на амилоидните (A β) пептиди, инициращ амилоидогенезата – ключов патологичен процес при невродегенеративни заболявания и е установен механизмът, по който куркуминът инхибира този процес.
- Чрез виртуален скрининг по метода на молекулния докинг на база данни, съдържаща над 6 млн. структури, са идентифицирани 11 нови инхибитори на ензима ацетилхолинестераза, чиито афинитет в нано- и микромолярната област е доказан експериментално.
- Чрез методи на лекарствения дизайн са създадени над 1300 производни на галантамина, скринирани и селектирани *in silico* за антихолинестеразна активност и лекарствено подобие. Най-перспективните от тях са синтезирани и тествани. Сред тях съединение **4b** е показало антихолинестеразна активност, над 180 пъти по-висока от тази на галантамина. Съединението е показало и антиоксидантна, антиамилоидна и антидепресантна активност при *in vitro*, *in vivo* и *ex vivo* тестове. Това съединение се очертава като перспективно мултицелствено средство за лечение на невродегенеративни заболявания.

По-важни научни постижения в областта на биоинформатиката:

- Създаден е метод за бинарно кодиране на първичната структура на пептиди, свързващи се към протеини и са изведени първите количествени матрици за определяне на мястото на антигенна деградация в протеазомата, за оценка на афинитета на пептиди към ТАР протеина (Transporter associated with antigen processing) и към 14 човешки и 9 миши МНС (Major histocompatibility complex) протеина от I клас. Количествените матрици са имплементирани в приложенията MHCpred и EpiJen, свободно достъпни в интернет.

- Направена е първата класификация на HLA (Human leukocyte antigen) протеините от клас I и клас II, базираща се на тримерната им структура. Класификацията включва и първото идентифициране на супертипове от локус HLA-C. Въведено е понятието „супертипов отпечатък“, позволяващо бързо и лесно класифициране на всички познати и новооткриващи се HLA протеини.
- Създаден е итеративен самосъгласуващ се PLS-базиран алгоритъм за предсказване афинитета на пептиди, свързващи се с човешки MHC протеини от клас II.
- Изведени са първите протеохеометрични модели за оценка на афинитета на пептиди към протеини от HLA клас II, локуси DR, DQ и DP. Моделите са имплементирани в приложението EpiTOP, свободно достъпно в интернет.
- Изведени са първите докинг-базирани количествени матрици за оценка на афинитета на пептиди към протеини от HLA клас II, локуси DR, DQ и DP. Матриците са имплементирани в специално създаденото за целта приложение EpiDOCK.
- Създаден е нов метод за идентифициране на имуногенни протеини, независещ от наслагването на секвенции и отчитащ основните физикохимични свойства на аминокиселините, изграждащи изследваните протеини. Методът е използван за *in silico* оценка на имунопротективни протеини с бактериален, вирусен, туморен, паразитен и гъбичен произход. Получените модели са имплементирани в създаденото от нас приложение за оценка на имуногенност на протеини VaxiJen. VaxiJen е широко използван за предварителна оценка на протеини като потенциални компоненти на субединични или епитопни ваксини. Оценката по VaxiJen е добила популярност в научната литература като VaxiJen score. Публикацията в BMC Bioinformatics е цитирана 1608 пъти към м. май 2024 г. (Scopus) и е най-цитираната публикация на проф. Дойчинова.
- Създаден е нов хеометричен метод за оценка на взаимодействията между пептиди и протеини, базиращ се на нормализираните честоти на аминокиселините от свързващото се ядро на пептидите. Методът е приложен за извеждане на модели, оценяващи афинитета на пептиди към алелите HLA-DQ2.5 и HLA-DQ8.1, асоциирани с възприемчивост към глутенова ентеропатия (целиакия). Моделите са имплементирани в приложението preDQ, разработено по проект, финансиран от Европейската агенция по безопасност на храните, и използвано за оценка на риска на нови протеини. Методът е универсален и може да бъде използван за оценка на взаимодействията между всякакви пептиди и протеини.