

СТАНОВИЩЕ

От

доц. д-р инж. Иван Динков Иванов

член на научно жури в конкурс за заемане на академичната длъжност ДОЦЕНТ по професионално направление 5.3. Комуникационна и компютърна техника (Компютърно моделиране с приложение в природните науки), обявен от ЮЗУ „Неофит Рилски“ в ДВ. Бр 94/29.11.2019г.

Относно: научната, научно-приложната и професионално-академичната дейност и продукция, представена от участника в конкурса

Кандидат: гл. ас. д-р ФАТИМА ИСМАИЛ САПУНДЖИ

I. Обобщени данни за научната продукция и дейността на кандидата

Кандидата за участие в настоящия конкурс гл. ас. д-р Фатима Исмаил Сапунджи е представила 1 монографичен труд, 1 книга по дисертацията и 20 научни труда извън тези от дисертационния труд за придобиване на образователна и научна степен „Доктор“.

Представените научни публикации могат да бъдат разделени на следните групи:

- 14 научни публикации в издания, които са реферирани и индексирани в световноизвестни бази данни с научна информация (Web of Science и/или Scopus);
- 6 доклади и абстракти в сборници от международни конференции.

Кандидатката е участвала в 12 научно-изследователски проекта.

Гл. ас. д-р Фатима Сапунджи започва педагогическата си дейност през 2013г. в Югозападен Университет "Неофит Рилски", Благоевград, като Хоноруван асистент, катедра „Информатика“, Природо-математически факултет. През 2015г. заема длъжността главен асистент, в катедра „Комуникационна и компютърна техника и технологии“, Технически факултет.

Гл. ас. д-р Фатима Сапунджи участва в разработките на следните учебни програми и дисциплини: Технологии в Интернет, Приложения за мобилни устройства, Разработване на приложения за мобилни операционни системи, Мултимедийни технологии, Структури от данни и алгоритми, Алгоритми в графи и мрежи, Иконометрия, Дискретно оптимизиране, Математическо моделиране на дискретни структури и процеси, Мултимедийни технологии, Оптимизация на дискретни структури, Теория на инженерния експеримент.

Справката за хорариум на водените от кандидатката лекции в ЮЗУ „Неофит Рилски” през последната година показва, че лекционните часове са 90, разпределени по 5 дисциплини. На базата на справка за обезпеченост на часове показва, че са осигурени 90 часа лекционни часове и 540 часа упражнения.

По време на своята педагогическа дейност кандидатката има 33 успешно защитили дипломанта. Всичко това е достатъчно основание за висока оценка на учебно-преподавателската и педагогическа дейност на гл. ас. д-р Фатима Сапунджи.

II. Оценка на научните и на практическите резултати и приноси на представената за участие в конкурса творческа продукция

Приносите на кандидатката са насочени към следните две основни области: 1) Математическо моделиране на лиганд-рецепторни взаимодействия, и 2) Компютърно моделиране и докинг за оценка на лиганд-рецепторни взаимодействия.

1. Като основни приноси приемат:

- Предложен е математически модел за фармакологичен агонизъм, включващ схемата на del Castillo–Katz, който позволява да се изведат експлицитни формули за афинитета и ефикасността на агонисти, да се опише ефекта от лиганд-рецепторното взаимодействие- биологичния отговор и да се оцени потентността на пълните и частични агонисти при изследване на големи серии вещества за оценка на QSAR;
- Построен е модел на бимолекулно взаимодействие лиганд-рецептор, при който случайните процеси на асоциация и дисоциация на лиганд и рецептор са представени като Марковски процес с краен брой състояния и непрекъснато време;
- Построени са модели на канабиноиден рецептор тип 1 и тип 2 чрез подхода хомоложно моделиране, като тяхната приложимост е апробирана посредством докинг с канабиноидни лиганди с известна биологична активност. Разработените модели позволяват оптимално да се определи афинитета на свързване на лигандите чрез оценъчната функция- ChemScore и могат да бъдат използвани в синтеза на лекарства;
- Създадени са *in silico* модели на канабиноидни и опиоидни рецептори, които могат да се прилагат за идентифициране и оценка на активност и селективност на канабиноидни и опиоидни лиганди. Чрез проведеното моделиране са анализирани връзките между виртуални данни на аналози на опиоидни и канабиноидни лиганди и експериментални данни за същата активност при експерименти върху изолирани тъкани;
- Представени са доказателства, за наличие на корелация между докинг резултати с модели на опиоидни и канабиноидни рецептори и параметри на опиоидни и канабиноидни лиганди, установени *in vitro*. Тези резултати позволяват да се прилага докинг процедурата в по-нататъшната ни работа, свързана с дизайн на нови активни и селективни лиганди към тези рецептори и до съкращаване процеса на създаване на нови лекарства;
- Предложен е подход за определяне на биологична активност, който може да се прилага при дизайн на нови съединения за канабиноидни и опиоидни рецептори. Беше установено, че полином на две променливи от трета степен, може да се приложи за описване на връзката структура-активност на нови лиганди, чрез представяне на ефикасността на съединенията като функция от стойностите на оценъчните функции от докинга и минималната (тоталната) енергия на свързване на лигандите при формираните лиганд-рецепторни комплекси. Това ще бъде от полза за съкращаване процеса на създаване на

нови активни и селективни лиганди към определен тип рецептор – в случая изследваната серия съединения формират стабилни лиганд-рецепторни комплекси с моделите на опиоидните и канабиноидните рецептори;

- Приложени са съвременни биоинформатични подходи като хомоложно моделиране, докинг и 3D визуализация с подбор на подходящ алгоритъм и оценъчна функция за виртуални анализи на структура-активност зависимости в търсене на селективни лиганди към опиоидни и канабиноидни рецептори.

В представената авторска справка кандидатката има 14 броя цитирания, от които 8 са в научни издания, реферирани и индексирани в бази данни с научна информация (Web of Science/ Scopus) и 6 са в други бази данни (Google scholar).

2. Значимост на приносите в науката и практиката

Посочените приносни резултати в научните трудове на кандидатката и тяхното цитиране определят значимостта и за науката и практиката. Наукометричните данни показват, че са изпълнени всички изисквания по отношение на минималните национални изисквания за заемане на академична длъжност "Доцент". От тях се вижда, че от минималните изисквани точки 400 за академична длъжност "Доцент", гл. ас. д-р Фатима Сапунджи декларира и е представила доказателства за 505 точки, което е висока оценка за тяхната значимост и признание.

III. Критични бележки и препоръки

Нямам бележки.

Препоръка – да материализира творческия си потенциал в написването на учебници и учебни пособия и да увеличи броя на самостоятелните научни публикации.

IV. Заключение

Отчитайки високата оценка за нейната учебно-преподавателска и педагогическа дейност и значимостта на представените от нея научни трудове, намирам за напълно основателно да гласувам убедено и положително за присъждането на гл. ас. д-р Фатима Исмаил Сапунджи на академичната длъжност „ДОЦЕНТ” по професионално направление 5.3. Комуникационна и компютърна техника (Компютърно моделиране с приложение в природните науки) към ЮЗУ Неофит Рилски – Благоевград.

Дата: 15.03.2020г.

Член на журито:

(доц. д-р инж. Иван Иванов)

Southwestern University "Neofit Rilski"

OPINION

from

Assoc. Prof. Eng. Ivan Dinkov Ivanov, Ph.D.

A member of the scientific jury in the competition for the occupation of the academic position Associate Professor in the professional field 5.3. Communication and computer technology (Computer modeling with application in the natural sciences), announced by SWU "Neofit Rilski" in the State Gazette, Issue 94 / 29.11.2019.

Subject: Scientific, applied and professional-academic activity and production presented by the participant in the competition

Candidate: Chief Assistant Professor Fatima Ismail Sapundzhi, Ph.D.

I. Summary information on the applicant's scientific production and activities

The candidate for participation in this competition As. Prof. Fatima Ismail Sapundzhi, Ph.D. has presented 1 monograph, 1 dissertation book and 20 scientific papers outside of the dissertation thesis for the doctorate degree.

The submitted scientific publications can be divided into the following groups:

- 14 scientific publications in publications that have been referenced and indexed in world-renowned scientific information databases (Web of Science and / or Scopus);
- 6 papers and abstracts in international conference proceedings.

The candidate has participated in 12 research projects.

Chief Prof. Fatima Sapundzhi, Ph.D. started teaching in 2013 at Southwestern University "Neofit Rilski", Blagoevgrad, as an Honorary Assistant, Department of Informatics, Faculty of Natural Sciences and Mathematics. Since 2015, he has held the position of Chief Assistant in the Department of Communication and Computer Engineering and Technology, Faculty of Engineering.

Chief Prof. Fatima Sapundzhi, Ph.D. has been involved in the development of the following curricula and disciplines: Technology on the Internet, Mobile Applications, Application Development for Mobile Operating Systems, Multimedia Technologies, Data Structures and Algorithms, Algorithms in Columns and Networks, Econometrics, Discrete Optimization, Mathematical Modeling of Discrete Structures and Processes, Multimedia Technologies, Optimization of Discrete Structures, Theory of Engineering Experiment.

The information on the hours of lectures conducted by the candidate - led lectures

at the NEU "Neofit Rilski" in the last year shows that the lectures are 90, divided into 5 disciplines. Based on the hours security report, 90 hours of lectures and 540 hours of practice are provided.

During her teaching career, the candidate has 33 successfully defended graduated students. All this is a sufficient reason for the high assessment of the teaching and pedagogical activity of Chief Prof. Fatima Sapundji, Ph.D.

II. Evaluation of the scientific and practical results and contributions of the creative production submitted for participation in the competition

The candidate's contributions focus on the following two main areas: 1) Mathematical modeling of pharmacological agonism, and 2) Computer modeling and docking for evaluation of ligand-receptor interactions.

1. *I take major contributions:*

- A mathematical model for pharmacological agonism comprising del Castillo-Katz scheme has been proposed. It allows to derive explicit formulas for affinity and efficacy of agonists, to describe the effect of the ligand-receptor interaction-biological response and to evaluate the potency of full and partial agonists in the study of a large series of ligands for the evaluation of QSAR;
- A model of bimolecular ligand-receptor interaction has been constructed in which the random processes of association and dissociation of ligand and receptor are represented as a Markov process with the finite number of states and continuous time;
- Models of cannabinoid receptor type 1 and type 2 have been generated using the homology modeling approach, and their applicability has been tested by docking with cannabinoid ligands with known biological activity. These models allow the ligand binding affinity to be optimally determined by the ChemScore function and can be used in drug synthesis;
- In silico models of cannabinoid and opioid receptors have been developed. They can be applied to identify and evaluate the activity and selectivity of cannabinoid and opioid ligands. The simulations analyzed the relationships between virtual analogues of opioid and cannabinoid ligands and experimental data on the same activity in experiments on isolated tissues. This is a reliable approach for the design of novel active and selective compounds for cannabinoid and opioid receptors;
- Evidences for the correlation between docking results with models of opioid and cannabinoid receptor and opioid and cannabinoid ligand parameters established in vitro are presented. These results allow us to apply the docking procedure in our further work related to the design of new active and selective ligands to these receptors and to shorten the process of creating new drugs;
- An approach for determining the biological activity is proposed. It can be applied to the design of novel cannabinoid and opioid receptor compounds. It has been found that a polynomial of two variables in third-degree can be applied to describe the structure-activity relationship of new ligands by presenting efficiencies of compounds as a function of the values of the scoring functions from docking procedure and the minimum (total) binding energy of ligands in the formed ligand-receptor complexes. This will be useful for shortening the process of creating new active and selective ligands to a particular type of receptor - in this case, the studied series of compounds form stable ligand-receptor complexes with opioid and cannabinoid receptor models. This is one way to determine QSAR;
- Modern bioinformatics approaches such as homology modeling, docking and 3D visualization with a selection of appropriate algorithm and scoring function for

virtual structure-activity dependency analyses in search of selective ligands to opioid and cannabinoid receptors.

In the submitted copyright reference, the candidate has 14 citations, 8 of which are in scientific publications, referenced and indexed in databases of scientific information (Web of Science / Scopus) and 6 in other databases (Google scholar).

2. *The importance of contributions to science and practice*

The cited results in the candidate's scientific works and their citation determine the importance for science and practice. Scientometric data show that all the requirements regarding the minimum national requirements for occupation of the academic position "Associate Professor" are fulfilled. They show that from the minimum required points 400 for the academic position of Associate Professor, Chief Prof. Fatima Sapundji, PhD declared and presented evidence for 505 points, which is highly appreciated for their importance and recognition.

III. Critical notes and recommendations

I have no notes.

Recommendation - to materialize its creative potential in writing textbooks and to increase the number of independent scientific publications.

IV. Conclusion

Considering the high appreciation for her teaching and pedagogical activity and the importance of her scientific works, I find it quite reasonable to vote confidently and positively for Chief Assistant Professor Fatima Ismail Sapundzhi, PhD, being awarded with the Academic Position, Assistant Professor ” in professional field 5.3. Communication and computer technology (Computer modeling with application in the natural sciences) at SWU Neofit Rilski - Blagoevgrad.

Date: 15.03.2020

Member of the jury:

(Assoc. Prof. Eng. Ivan Ivanov, Ph.D.)