

Югозападен университет „Неофит Рилски”- Благоевград

С Т А Н О В И Щ Е

от доц. д-р Велин Спасов Кралев, Югозападен
университет "Неофит Рилски" – Благоевград

член на научно жури в конкурс за заемане на академичната длъжност
ДОЦЕНТ в професионално направление

5.3. Комуникационна и компютърна техника (Компютърно моделиране с
приложение в природните науки) в ЮЗУ "Неофит Рилски" Благоевград,
обявен в "Държавен вестник",
бр. 94, от 29.11.2019 г.

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

Единствен кандидат: гл. ас. д-р Фатима Исмаил Сапунджи

I. Обобщени данни за научната продукция и дейността на кандидата

От подадените документи и доказателствени материали е видно, че кандидатката д-р Сапунджи отговаря на всички изисквания на Закона за развитие на академичния състав в Република България, правилника за прилагането му и специфичните изисквания в правилника на ЮЗУ "Неофит Рилски" за заемане на длъжността "Доцент", а именно:

1. Придобила е образователна и научна степен "Доктор" в професионално направление 4.6. Информатика и компютърни науки през 2015 г.
2. Заемала е академичната длъжност „Главен асистент” в катедра „Комуникационна и компютърна техника и технологии” в Технически факултет към ЮЗУ повече от 2г.
3. Представила е публикуван монографичен труд “Моделиране на взаимовръзката структура – биологична активност”, който не повтаря представената за придобиване на образователна и научна степен "Доктор" дисертация.
4. Отговаря на минималните национални изисквания и на допълнителните изисквания на ЮЗУ "Неофит Рилски", както следва:
 - Група показатели А: 50 т. за дисертационен труд;
 - Група показатели В: 100 т. за монография;
 - Група показатели Г: публикувана книга на базата защитен дисертационен труд – 30 т. и 14 публикации в издания с IF/SJR ранг, от които кандидатката получава над 290 т., при необходим минимум от 200 т.

- Група показатели Д: 14 цитата, 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), от които кандидатката получава 92 т., от минимално необходимите 50 т.
- 5. Кандидатката няма доказано по законоустановения ред плагиатство в научните трудове.
- 6. Представените за участие в конкурса монография и публикации са по направлението на обявения конкурс в професионално направление 5.3. Комуникационна и компютърна техника (Компютърно моделиране с приложение в природните науки).

Така кандидатката постига общ сбор от 535 т. при необходим минимум от 400 т.

Освен това д-р Сапунджи е представила и списък от над 30 публикации, от които 25 са реферирани в Scopus и/или Web of Science и 30 доклада от конференции.

Д-р Сапунджи има и впечатляваща преподавателска активност. Тя преподава над 10 дисциплини в ЮЗУ в ОКС "Бакалавър" и ОКС "Магистър". Кандидатката е участвала активно и в научно-изследователски проекти, общо 4 на брой, 1 международен проект, 1 финансиран от ФНИ, и 2 вътрешни за ЮЗУ "Неофит Рилски". Всички й трудове са на английски език, с изключение на монографията и са със значителни теоретични и приложни приноси, като един от тях е отличен с награда за най-добра статия на 2019 г. в списание „International Journal of Online and Biomedical Engineering“.

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

Приемам предоставената справка за приносите на гл.ас.д-р Сапунджи. Изследванията на кандидатката са върху количествени зависимости структура-активност (QSAR) и подходи на компютърното и математическото моделиране за установяване на връзка между структурата на химични съединения и проявявания от тях биологичен ефект.

Научни приноси

Научно-изследователските разработки и постиженията с приносен характер могат да се обособят в следните насоки: 1) Математическо моделиране на лиганд-рецепторни взаимодействия и 2) Компютърно моделиране и докинг за оценка на лиганд-рецепторни взаимодействия.

По първата тематична област е предложен математически модел, включващ механизма на del Castillo–Katz за две състояния на рецептора, който описва по-пълно природата на частичния агонизъм при изследвания върху изолирани тъкани.

По втората тематична област са създадени компютърни модели на канабиноидни и опиоидни съединения, които могат да се прилагат за идентифициране и оценка на активност и селективност на съответните лиганди. Чрез проведеното моделиране са анализирани връзките между виртуални данни на аналози на изследваните лиганди и експериментални данни за същата активност при експерименти върху изолирани тъкани. Предложен е подход за определяне на биологична активност, който може да се прилага при дизайн на нови активни и селективни съединения за канабиноидни и опиоидни

рецептори. Това е надежден подход за дизайн на нови активни и селективни съединения за канабиноидни и опиоидни рецептори.

Научно-приложни приноси

Важността на проведеното математическо и компютърно моделиране и докинг за оценка на лиганд-рецепторните взаимодействия, в сравнение с дългогодишните тестове с изолирани тъкани и експерименти с животни, е факта, че получаването на данни за структура-активност зависимости на молекулно ниво не изискват средства и човешки ресурс за скъпи органични синтети на големи серии от съединения или скъпи и продължителни фармакологични и физиологични експерименти с животни. Получените резултати могат да бъдат от полза при дизайна на нови лекарства, свързани с противоболково действие.

III. Критични бележки и препоръки

Нямам критични бележки по така представените документи на д-р Сапунджи за участие в конкурса. Познавам я от работата и като студентка и като дипломантка и впечатленията ми от нея като научен работник, който създава не само чисто научна, но и приложима в практиката продукция, са отлични. Препоръката ми е да продължи да работи все така качествено.

IV. Заключение

Представената научна продукция от кандидатката и нейната достатъчност по отношение на качество и на количество, което е в съответствие с изискванията на професионалното направление, по което е обявен конкурса от една страна, и от друга получените резултати и техния важен научен принос, ми дават съществено основание да обява своята **положителна** оценка.

Предвид характера на изследователската и преподавателската работа на кандидатката, предлагам на членовете на научното жури и на членовете на факултетния съвет на Технически факултет към ЮЗУ "Неофит Рилски", да бъде избрана **гл. ас. д-р Фатима Исмаил Сапунджи** на академична длъжност "Доцент" по професионално направление **5.3. Комуникационна и компютърна техника (Компютърно моделиране с приложение в природните науки)**.

Дата:

15.03.2020 г.

Член на журито:

/доц. д-р Велин Кралев/

South-West University “Neofit Rilski”

OPINION

By Assoc.Prof. Velin Kralev,
South-West University “Neofit Rilski”

Member of the Scientific panel of competition for the
academic position "Associate Professor" in the professional field

5.3 Communication and computer technology (Computer modeling by application in the natural sciences), announced by South-West University “Neofit Rilski” in Official gazette, № 94/29.11.2019

About: scientific, applied research and professional academic activity and production, submitted by the participants in the competition

Sole candidate: Chief Assist. Prof. Fatima Ismail Sapundzhi, PhD

I. Summarized data about scientific production and activity of the candidate

From the submitted documents and evidentiary materials, it is clear that the candidate d-r Sapundzhi fulfills all obligatory demands of the Law for academic staff development in the Republic of Bulgaria and the specific demands in its application rules of SWU “Neofit Rilski” for the position of “Associate Professor”, as follows:

1. She acquired educational and scientific degree “Doctor” in professional field 4.6. Informatics and computer sciences in 2015.
2. She occupied “Senior Assistant” position at the Department of Communication and Computer Engineering and Technologies at the Faculty of Engineering of the South-West University more than demanded minimum of two years.
3. She presented published monography: “Modeling the structure - biological activity relationship” that does not repeat submitted for doctoral degree dissertation.
4. She fulfils the minimal national and additional demands of SWU, as follows:
 - Group of indicators A: 50 p. for doctoral degree;
 - Group of indicators B: 100 p. for monography
 - Group of indicators Γ: published book based on the doctoral dissertation and 14 papers in sources with IF/SJR rank, from which the candidate obtains totally 293 p., more than demanded minimum of 200 p.

- Group of indicators Д: 14 citations - 8 of which are in scientific works referred and indexed in world-famous data base (Scopus and Web of Science), 6 in other refereed scientific peer-reviewed journals (Google scholar) from which the candidate obtains 92 p., i.e. almost two times more than demanded minimum of 50 p.

5. There is no any proof for plagiarism in the candidate's scientific works.

6. The submitted for the competition monography and papers are in the area of the announced competition 5.3 Communication and computer technology (Computer modeling by application in the natural sciences).

Thus, the candidate achieves a total of 535 p. with a minimum required of 400 p.

Besides Dr. Sapundzhi submitted a list of more than 30 publications, 25 of which refereed in Scopus and/or Web of Science and 30 reports at conferences.

Dr. Sapundzhi also has an impressive teaching career. She teaches over 10 disciplines at SWU for Bachelor's and Master's degrees. The candidate participated actively in scientific projects, a totally of 7, 1 of which is an international project, 1 funded by the Bulgarian Science Fund and 2 internal for "Neofit Rilski". All the candidate's works are in English, except for the monography, with significant theoretical and applied contributions, one of which was awarded the Best Article of 2019 in the International Journal of Online and Biomedical Engineering.

II. Assessment of the scientific and application results and contributions of the submitted for the competition creative production

I accept the submitted information about the contribution of d-r Sapundzhi.

Researches of the candidate is based on the quantitative structure-activity relationships (QSAR) and the computer and mathematical modeling approaches to establish the relationship between the structure of chemical compounds, and their biological effect.

Scientific contributions

Research and development achievements can be separated thematically in the following directions: 1) Mathematical modeling of pharmacological agonism and 2) Computer modeling and docking for evaluation of ligand-receptor interactions.

In the first thematic area, a mathematical model incorporating the del Castillo – Katz mechanism for two receptor states that more fully describes the nature of partial agonism in studies on isolated tissues is proposed.

In the second thematic area, computer models of cannabinoid and opioid compounds were developed that can be applied to identify and evaluate the activity and selectivity of the

respective ligands. By modeling between virtual data of analogues of tested ligands and the experimental data for the same activity in experiments on isolated tissues were analysed. This is a reliable approach for the design of novel active and selective compounds for cannabinoid and opioid receptors.

Applied research contributions

The benefit of the application of computer modeling and docking to evaluate ligand-receptor interactions, compared to long-term *in vitro* tests, is the fact that obtaining molecular structure-level dependency data does not require the tools and human resources for expensive and labour-intensive organic syntheses of large series of compounds or expensive and lengthy pharmacological and physiological experiments with isolated animal preparations. The obtained results can be successfully applied to the detection of the mechanism of the binding of test ligands and can be used in drug design.

III. Critical notes and recommendations

I do not have any critical notes on the submitted by Dr.Sapundzhi documents for participation in the condition. I know her from her work as a student and as my graduate student. My impressions from her as a scientist who develops not only pure science but also applicable in practice production are excellent.

My recommendation is to continue working in the same qualitative manner.

IV. Conclusion

The submitted scientific production by the applicant and its sufficiency in terms of quality, quantity and compliance with the professional field in which the competition was announced, on the one hand, and on the other, the results obtained and their indisputable scientific contribution, give me reason to declare my positive assessment.

Given the nature of the candidate's research and teaching work, I propose that the members of the Scientific Jury and the members of the Faculty Board of the Faculty of Engineering at South-West University "Neofit Rilski" be elected Chef. Asst. Prof. Fatima Ismail Sapundzhi, PhD in Academic Position "**Assistant Professor**" in scientific area **5.3 Communication and computer technology (Computer modeling by application in the natural sciences)**.

Data: 15.03.2020

Member of scientific jury:

/Assoc. Prof. Velin Kralev/