

СТАНОВИЩЕ

за дисертационния труд на **Александър Асенов Кантарджиев**
на тема *“Протонни равновесия и електростатични взаимодействия в протеинови
молекули”*

за придобиване на ОНС *‘доктор’*
от член на НЖ проф. д-р **Аля Таджер**, ФХФ-СУ

При изготвяне на становището разполагах с дисертацията, автореферата, две публикации и автобиография. Присъствах лично и на обсъждането на дисертационния труд. От колоритната творческа автобиография става ясно, че докторантът е получил висше образование по молекулярна биология в БФ-СУ, завършено през 2001 г. с образователна степен магистър. В периода 2002-2005 е редовен докторант под ръководството на проф. Борис Атанасов. Преди и след този период работи предимно като химик в Института по органична химия, прекъсвайки два пъти за работа в частни фирми като програмист.

Представеният дисертационен труд обхваща 150 страници и е илюстриран с известен брой снимки, 40 фигури и 10 таблици. Материалът е структуриран в 5 раздела. Използвани са 115 литературни източника. Използваната литература бих определила като „класика в жанра”, и принадлежи изцяло на 20-ти век. Собствените резултати на докторанта са вложени в 5 публикации – 4 статии и една глава от монографичен сборник, но дисертацията е базирана само на 2 от статиите, в които дисертантът е първи автор. Последните са във високоимпактното ($IF > 8$) списание *Nucleic Acids Research* и датират съответно от 2006 и 2009 г. Публикациите дават описание на създадените програмни продукти, тяхната теоретична основа и програмна реализация, както и резултати от използването им за изследване на конкретни системи. Не са представени забележани цитати, но е известно, че създадените инструменти се ползват on-line от десетки потребители. Изискванията за придобиване на ОНС *‘доктор’* заложи в ЗРАСРБ и правилника на ИОХЦФ-БАН за приложението му са изпълнени.

Претенциозно озаглавеният увод декларира важността на коректната оценка на електростатичните взаимодействия при изследване на макромолекули, в частност белтъчни, и основните подходи към описанието им. Следва обзорна част, в която са представени строгите и приближени методи за изследване на електростатични взаимодействия при протонни и йонизационни равновесия, представени са обектите на изследването и е аргументирана нуждата от провеждането му. Едва след това са формулирани конкретните задачи поставени в дисертацията. Разделът „Резултати и обсъждане” започва с повторно излагане на формализъм, вече показан на стр. 9-10, за

обосновка на използвания теоретичен подход, следван от конкретния формализъм и граници на приложение, детайли по проблемите в програмната му реализация, оценка на глобални, доменни и локални характеристики на макромолекулите, влияние на разтворителя. След тази многопрофилна и извънредно интересна част е показан изчерпателен анализ на електростатиката в TEM1 β -лактамазата. Изследването е обобщено много точно в 3 приноса и 4 извода, последните касаещи конкретно β -лактамазата.

Дисертационният труд е написан изключително професионално и показва забележителна широта в подготовката на дисертанта. Ясно е демонстрирано, че кандидатът владее методите на физикохимията, на статистическата механика и термодинамика, на изчислителната химия, на биофизиката и молекулярната биология и не на последно място притежава умение за програмиране на няколко програмни езика и контрол върху дистанционно ползване на сървърни реализации. Дисертацията е едно увлекателно, поучително и донякъде необичайно четиво, със снимки на известни учени, формули с най-различен формат и дори една глава без съдържание (3.14). Дисертантът е показал безспорна ерудиция и артистизъм. Докато в научен аспект работата определено представлява интерес и реализацията и очевидно е изисквала продължителна, задълбочена и инвентивна работа, от техническото изпълнение има какво да се желае. Опитът за популяризаторски стил не се съчетава добре с прекомерното използване на чуждици. Бих препоръчала да не се прави опит да се превеждат чуждите имена на български – някои имена изглеждат абсурдно. Значителен е броят на правописните и граматически неточности. Подфигурните текстове са неинформативни или направо отсъстват.

Авторефератът правилно отразява съдържанието на дисертацията. Основните приноси са формулирани ясно и компактно. Резултатите са представени в 2 изключително добре написани статии, чийто професионализъм – научен и лексикален – е забележителен. Докладвани са в 3 съобщения на 2 международни форума.

Личните ми впечатления са за колега с много широк хоризонт, забележителен интелект, невероятна самокритичност и изненадваща липса на самоувереност. Въпреки последното, вярвам, че го му предстои богата и успешна научна кариера.

Александър Кантарджиев е показал убедително, че не само има обширни знания, но и умее творчески да ги използва, доразвива, прилага и публикува. Това поставя извън всякакво съмнение факта, че дисертантът е покрил всички критерии и нормативни изисквания за придобиване на ОНС ‘доктор’. Въз основа на всичко гореизложено убедено препоръчвам на почитаемото Научно жури да **присъди на Александър Кантарджиев образователната и научна степен «доктор»**.

София, 11.11.2013 г.

Подпис:

/А. Таджер/