

# РЕЦЕНЗИЯ

на дисертационен труд

за придобиване на образователната и научна степен „доктор”

в професионално направление 4.1 Физически науки, Физика на атомите и молекулите,

по процедура за защита във Физически факултет (ФзФ)

на Софийски Университет „Св. Климент Охридски“ (СУ)

Рецензията е изготвена от: доц. д-р Цветелина Венелинова Паунска, Физически факултет на СУ, в качеството си на член на научното жури съгласно Заповед № РД 38-469/23.07.2024 г. на Ректора на Софийския Университет.

**Тема на дисертационния труд: “Екстраполационни свойства на потенциала Morse-Long Range при големи междуядрени разстояния”**

**Автор на дисертационния труд: Алкета Синанай**

## **I. Общо описание на представените материали**

### **1. Данни за представените документи**

Кандидатът г-жа Алкета Синанай е представила дисертационен труд на английски език и Автореферат на английски и български език, а така също и задължителните таблици за Физическия факултет (ФзФ) от Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в СУ „Св. Климент Охридски“. Представени са и **11** на брой други документи: автобиография, диплома за бакалавър и магистър, декларация за допускане до предзащита, декларация за авторство на дисертацията, протокол за плагиатство (Прил. 1), становище за плагиатство (Прил. 2), доклад за плагиатство, научни публикации по дисертацията (3), заповед за удължаване срока на докторантурата и удостоверение за положени задължителни изпити по докторантурата. Предоставените документите са съгласно изискванията на Физическия факултет при СУ „Св. Климент Охридски“.

**Представените по защитата документи от кандидата съответстват на изискванията на ЗРАСРБ, ППЗРАСРБ и Правилника за условията и реда за придобиване на**

научни степени и заемане на академични длъжности в СУ „Св. Климент Охридски“ (ПУРПНСЗАДСУ).

## **2. Данни за кандидата**

Кандидатът Алкета Синанай е зачислена като редовен докторант към катедра „Оптика и спектроскопия“, към Физическия Факултет на Софийския университет „Св. Климент Охридски“ на 01.07.2019 г. След прекъсване поради отпуск по майчинство г-жа Синанай е продължила работата по докторската си теза и е отчислена с право на защита на 24.06.2024 г. Бакалавърската степен на кандидата е получена от Университета „Александър Джувани“ в Елбасан, Албания (2011 г.) в Департамента по математика и физика. Магистратурата на Алкета Синанай е от Университета в Тирана, завършена е през 2016 г. Професионалният опит на кандидата е в сферата на образованието и науката. Работила е като учител в основно и средно училище и като асистент в Университета „Александър Джувани“. Участвала е в множество национални и международни научни форуми и стажове и обучения (общо **16**) в областта на Физиката и Математиката.

## **3. Обща характеристика на научните постижения на кандидата**

Дисертационният труд на кандидата е в обем от 137 страници и се състои от Увод, 5 глави и библиография включваща 79 цитирани източници. За по-добра ориентация при четене са представени и списъци на фигурите, таблиците и абривиатурите използвани в текста на дисертацията.

Научната работа по дисертацията е в областта на молекулната физика и по конкретно в моделирането на криви на потенциалната енергия (ПЕС). Възстановяването на достатъчно точни потенциални криви е изключително важно в молекулната спектроскопия, тъй като дава възможност за прецизно изчисляване на енергиите на нивата и интензивността на спектралните линии. Работата на г-жа Синанай е насочена към моделиране на молекулни спектри, преди всичко на асимптотичната част на потенциала при големи междуядрени разстояния. Използвано е основното електронно състояние на калциевия димер ( $\text{Ca}_2$ ), изследвано в предишни работи. Резултатите в дисертационния труд показват, че моделът на потенциала Morse Long Range (MLR) има добри екстраполационни свойства и дава реалистични стойности на енергията на дисоциация  $D_e$ . По отношение на дисперсионните коефициенти определянето на водещия коефициент  $C_6$  не е така надеждно, но внасянето на ограничена неопределеност в  $C_6$  значително намалява границите на неопределеност на  $D_e$ . Много полезен резултат от работата е и раз-

работването на методика за намиране на неопределеностите на параметрите на PEC произтичащи от избора на модел.

Научните публикации на кандидата са три и са отразени в дисертационния труд. Две от тях са в реномирани списания с импакт фактор, квантили Q3 (*Journal of Molecular Spectroscopy*) и Q4 (*Acta Phys. Polonica*) и попадат в група II от допълнителните изисквания на Физическия факултет. Третата публикация (доклад от конференция) също е индексирани в платформата SCOPUS и е с SJR (0.115). Алкета Синанай е водещ автор с основен принос и в трите научни публикации по дисертацията. Кандидатът има три участия на научни конференции, като са представени два устни и един постерен доклад. Трябва да се отбележи, че кандидатът е първи и единствен съавтор на ръководителя си във всички публикации.

Научните публикации, включени в представения ми дисертационен труд, напълно покриват минималните национални изисквания (по чл. 2б, ал. 2 и 3 на ЗРАСРБ) и съответно на допълнителните изисквания на СУ „Св. Климент Охридски“ за придобиване на образователната и научна степен „доктор“, в съответната научната област и професионално направление. Въз основа на предоставените документи – Авторска справка за приносния характер на трудовете (сравнителни таблици за националните изисквания и тези на ФзФ), протокол за плагиатство (Приложение 1), становище за плагиатство (Приложение 2) и Заявление за авторство – с пълна убеденост може да се заяви, че: Включените в дисертационния труд научни публикации не повтарят такива от предишни процедури за придобиване на научно звание и академична длъжност. Няма доказано по законоустановения ред плагиатство в представените дисертационен труд и Автореферат. Авторефератът отразява точно съдържанието на дисертацията.

#### **4. Характеристика и оценка на преподавателската дейност на кандидата (ако има изискване в ПУРПНСЗАДСУ за това)**

В ПУРПНСЗАДСУ и индивидуалният план на Алкета Синанай няма изискване за извършване на преподавателска дейност. Кариерата на кандидата е изцяло в сферата на образованието. Съдейки от автобиографията на г-жа Синанай, тя определено има богат педагогически опит, но по време на докторантурата си, не е водила упражнения или семинари във Физическия факултет.

## 5. Съдържателен анализ на научните и научно-приложните постижения на кандидата съдържащи се в материалите за участие в конкурса

Кандидатът, не е участвал пряко в експериментални измервания, но работата ѝ е свързана с обработка и анализ на огромно количество експериментални данни. Това е едно комплексно изследване изискващо много добра теоретична подготовка и опит в работата с различни софтуерни продукти.

Дисертационният труд има ясно формулирани цели, които са представени в уводната част: 1) Създаване на методика за оценка на неопределеността при определяне на параметрите на потенциална крива на молекула, енергия на дисоциация  $D_e$  и основния дисперсионен коефициент  $C_6$ . Тази неопределеност трябва да зависи само от подбора на експерименталните данни, а не от избора на модел, с който се фитват данните. 2) Да се намери начин неопределеностите на  $D_e$  и  $C_6$  от матрицата на вариациите и ковариациите да бъдат сравнени с реалните неопределености. 3) Да се отговори на въпроса, с каква точност се определят  $D_e$  и  $C_6$  с ограничен набор експериментални данни. 4). Как изборът на брой коефициенти в асимптотичен модел, т.е. теоретичните предсказания, влияе върху точността, с която се определят  $D_e$  и  $C_6$ .

В Глава 2 авторът въвежда основите на теорията на енергетичните нива на двата-томните молекули. Първо е представен един по-интуитивен кванто-механичен подход, чрез който са въведени основните движения в молекулата, в резултат на които имаме електронни, вибрационни и ротационни енергетични състояния. След това в главата е въведено строго теоретичното описание на потенциалните криви  $U(R)$ , като решение на радиалното уравнение на Шрьодингер (RSE). Описан е основен квантово механичен пертурбационен метод – Inverse perturbation approach (IPA), чрез който може да се възстанови PEC, съответстващ на експерименталните данни в рамките на тяхната неопределеност. Този метод е основен за получаване на точни потенциални криви с налични експериментални данни. За да се възстанови далечната областта на потенциалната крива (асимптотично голямо междуатомното разстояние) и някакъв брой параметри трябва да се намери фитваща функция. Чрез нея се прави екстраполация, ето защо особено важно е тя да отговаря на определени изисквания.

Именно на критичният анализ на различни видове потенциали е посветена глава 3 от дисертацията. Разгледани са следните потенциали: Морзов потенциал, потенциал на Ленард-Джоунс, Разширен Морзов осцилатор (ЕМО), Потенциал на Морз-Ленард-Джоунс, Потенциал на Morse-Long-Range (MLR), Полиноми на Чебишев, Полиноми от Хановер и Сплайн форма. В тази глава са направени симулационни тестове с най-перспективните потенциални функции, като са фитвани експериментални данни за мо-

лекулата на  $\text{Ca}_2$ . Чрез Монте Карло симулации е внесен синтетичен шум към експерименталните данни със стандартно отклонение  $\sigma = 0.1 \text{ cm}^{-1}$  и генерираните данни са напасвани, чрез промяна на параметричните коефициенти на потенциалните функции. Резултатите показват, че ЕМО дава разумна стойност за  $D_e$ , но се влияят силно от избора на стойността на референтния радиус  $R_{\text{eff}}$ . При потенциалът MLR симулациите показват силна корелация между коефициентите. Критичен е и избора на брой фитващи параметри. Полиномите на Чебишев също са тествани, като възможност за модел за екстраполация на потенциала при големи междуядрени разстояния. Като повечето полиномни функции те осигуряват лесно напасване на коефициентите, но корелациите между параметрите са големи и е необходимо внимание при избора на оптимален набор от параметри. Този модел може да бъде прилаган ако имаме експериментални данни за по-големи междуядрени разстояния. От направения анализ и сравнение на различни модели (функции) авторът прави извода, че най-подходящ за поставените в изследването изисквания е потенциалът Morse-Long-Range.

В глава 4 е дефинирана областта от потенциалната крива при далечни разстояния и са анализирани експериментални данни от литературата за основните състояния на молекулите на  $\text{Rb}_2$ ,  $\text{Ca}_2$ ,  $\text{NaRb}$  и водородните халогениди. Тези състояния са получени само по експериментален път и са случаи отвъд приближението на Борн-Опенхаймер.

Глава 5 от дисертацията съдържа основният принос на кандидата към изследването. Тя е посветена на описание на разработената **методика** за изследване на екстраполационните свойства на потенциалът Morse-Long-Range. За провеждане на изследването отново са ползвани експериментални данни за основното състояние на калциевия димер. Фитнати са  $(\beta_i, D_e, C_m, r_e)$  за широк диапазон от фиксираните параметри. Ако получените резултати за  $D_e$  и  $C_6$  не са много разхвърляни независимо от избора на фиксираните параметри, то екстраполационните свойства на потенциала се считат за добри. В дисертацията подробно е представена фитващата процедура, която използва две програми `betafit` и `IPA8`. Чрез кодът `betafit` от измерен точков потенциал се генерират MLR потенциални криви при подходящо подбрани фиксирани параметри. Програмата `IPA8` реално служи за прецизна дообработка на тези MLR потенциални криви, чрез фитване на параметрите  $(\beta_i, D_e, C_m, r_e)$ , докато се получат разлики между пресметнати и експериментални енергии с минимална неопределеност. За контрол и управление над процедурата е написан скрипт на Python. Неопределеностите са оценени, чрез матрицата на вариациите и ковариацията.

В глава 6 са обобщени графично резултатите от фитващата процедура с потенциала MLR. Доказано е, колко важен е избора на модел, за да се получи коректна стойност на енергията на дисоциация и на параметъра  $C_6$ . Този избор влияе на неопределеностите, с които се определят коефициентите. Конкретен резултат от обработката е, че при фиксиране на два от параметрите  $C_8$  и  $C_{10}$ , се получават значително по-ниски стойности за неопределеностите на  $D_e$  и  $C_6$ . Получените резултати са анализирани, в контекста на подобни изследвания на други автори.

В тази глава е изследвано влиянието на ограничен набор от данни за енергиите на вибрационните нива, за областта описваща по-горните области на потенциалната крива. Методиката на фитване с потенциала MLR е приложена, за хипотетичните случаи с известни енергии до  $v'' = 38, 35, 30$  и  $25$ . Поведението на потенциала MLR показва неочаквано добро поведение. Дори когато се екстраполира от относително ниски  $v''$  се получават стойности близки до най-добрата оценка за енергията на дисоциация  $D_e$ .

Основният резултат е, че по отношение на дисперсионните коефициенти определянето на водещия коефициент  $C_6$  не е така надеждно, но внасянето на ограничена неопределеност в  $C_6$  значително намалява границите на неопределеност на енергията на дисоциация  $D_e$ .

## 6. Критични бележки и препоръки

Към оформлението на дисертационния труд имам забележки, те преди всичко касаят изписването на формулите и дефинирането на величини. В текста една и съща величина е изписвана като „*Italic*” и като „*Justify*“, което затруднява четенето и не е коректно. Формула 2.1 (стр. 17) и 2.2 (стр. 19) са една и съща формула за Кулоновата сила на взаимодействие между ядрата, т.е. дефинирано е едно и също нещо 2 пъти. В някои формули липсват сумационни индекси (например формула 5.16, стр. 104). В същата формула, не е дефинирано „*m*”. Често в текста “ $\sigma$ ” е изписано като “*s*”. На стр. 91 основното електронно състояние на  $\text{Ca}_2$  е означено в текста под фигурата  $X^1\Sigma_g^+$ , а в основния текст е  $X^1S_g^+$ . Изредените пропуски се срещат често в текста, така че препоръката ми е да се изчете внимателно тезата и да се отстранят. Качеството на фигурите в Глава 3 би могло да се подобри.

Въпреки споменатите забележки, смятам, че работата има научно-изследователска стойност.

Имам следните въпроси към кандидата:

1. Доколко от направените изследвания може да се заключи, че разработената методика може да се приложи за определяне на  $D_e$  и за други молекули с електронни състояния подобни на  $\text{Ca}_2$ ?

2. В дисертацията се ползват експериментални данни за калциевия димер главно от статията: O. Allard, C. Samuelis, A. Pashov, H. Knöckel и E. Tiemann, „Experimental study of the Ca<sup>2+</sup> 1S+1S asymptote.“ Eur. Phys. J. D., том 26, pp. 155-164, 2003. От изложението и от направените публикации става ясно, че целта не е обработването на данни от различни спектрални измервания, а по скоро изследване на екстраполационните качества на потенциала MLR. Все пак планирали ли сте да приложите фитващата процедура с други експериментални данни, ако разбира се са налични такива подходящи в литературата?

#### 7. Лични впечатления за кандидата

Нямам лични впечатления от кандидата.

#### 8. Заключение

След като се запознах с представените дисертационен труд, Автореферат и другите материали, и въз основа на направения анализ на тяхната значимост и съдържащи се в тях научни и научно-приложни приноси, **потвърждавам**, че научните постижения **отговарят** на изискванията на ЗРАСРБ и Правилника за приложението му и съответния Правилник на СУ „Св. Климент Охридски“ за **придобиване на образователната и научна степен „доктор“**. В частност кандидатът удовлетворява минималните национални изисквания в професионалното направление, както и минималните изисквания на Физическия факултет и не е установено плагиатство в представените по конкурса дисертационен труд, Автореферат и научни трудове.

Давам своята **положителна** оценка на дисертационния труд.

#### II. ОБЩО ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Въз основа на гореизложеното, **препоръчвам** на научното жури да присъди **образователната и научна степен „доктор“** в професионално направление 4.1 Физически науки на Алкета Синанай, след успешно представяне на защитата.

25.10 2024 г.

Изготвил рецензията: .....

(доц. д-р Цветелина Паунска)