

# РЕЦЕНЗИЯ

на дисертационен труд

за придобиване на образователната и научна степен „доктор”

в професионално направление 4.1. Физически науки (Атомна и молекулярна физика)

по процедура за защита във Физически факултет (ФзФ)

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

**Рецензията е изготвена от:** проф. дфн. Елена Стойкова, Институт по оптически материали и технологии – Българска Академия на науките, в качеството ѝ 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 на Морс за големи междуядрени разстояния”

**Автор на дисертационния труд:** Алкета Али Синанай

## I. ОБЩО ОПИСАНИЕ НА ПРЕДСТАВЕНИТЕ МАТЕРИАЛИ

### 1. Данни за представените документи

Докторант Алкета Али Синанай е представила дисертационен труд на английски език и Автореферат на български и английски език, а така също и задължителните таблици за Физически ф-т от [Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в СУ „Св. Климент Охридски“](#). Представени са общо 9 други документа (дипломи за висше образование, автобиография по европейски образец, заповед за записване и заповед за удължаване на докторантурата, заявление за предварителна защита, декларация за авторство, 3 публикации по темата на дисертацията), които подкрепят постиженията на кандидата. Проверката за съпадение на дисертацията показва много ниски стойности, значително под приетите критични стойности. Алкета Синанай е положила всички изисквани изпити в рамките на образователната програма. Представените по защитата документи от докторанта 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**

Докторант Алкета Синанай има солиден професионален опит в областта на физиката. След като завършва през 2014 г. Университета „Александър Хувани“ в Елбасан, Факултет по природни науки, катедра по математика и физика и през 2016 г. Тиранския университет, Факултет по природни науки, катедрата по физика, тя става докторант през 2019 г. в катедрата по оптика и спектроскопия на Физическия факултет в СУ „Св. Климент Охридски“. От завършването си насам тя е ангажирана като преподавател в средното образование и като асистент-преподавател в Университета „Александър Хувани“ в Елбасан, Факултет по природни науки, където организира семинари и лабораторни упражнения по обща физика, теоретична механика, астрономия, експериментална физика, безразрушителен контрол за структурна цялост, материалознание и технология на материалите, оборудване и мониторинг на околната среда. Тя е автор на няколко публикации, има добри умения за работа със софтуер и притежава над 10 сертификата за участие в международни конференции.

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

Представеният за рецензиране дисертационен труд разглежда много значима задача в областта на молекулярната спектроскопия, а именно анализа на потенциалните енергийни криви, използвани за интерпретация на спектроскопските данни. Анализът се основава на потенциалната крива на Морс за случая на големи междуядрени разстояния, която е математически модел, използван като приближение на потенциалната енергия на двуатомна молекула в зависимост от междуатомното разстояние. Потенциалът на Морс за големи разстояния е особено ценен за изследване на молекулните вибрации и дисоциацията на връзките, тъй като осигурява по-реалистично описание в сравнение с модела на прост хармоничен осцилатор, отчитайки анхармоничността на връзките и крайната стойност на енергията на дисоциация. Математическите изрази за използваните потенциални енергийни криви трябва да водят до гъвкави решения и да позволяват приближения за големи разстояния, както и да осигуряват плавни и диференцируеми криви. Далечната част на потенциалните енергийни криви е от решаващо значение за научната област охлаждане и улавяне на атоми. Основната цел на анализа в дисертацията е разработването на методология за оценка на неопределеностите в енергията на дисоциация и водещия коефициент на дисперсия - основните параметри на потенциала за големи разстояния - въз основа на неопределеностите в експерименталните данни и теоретичните предсказания. За да постигне тази цел, докторантът е извършил задълбочено изследване на теорията на потенциалните енергийни криви, като е включил тези знания в дисертацията. Освен значимостта на представения обзор и анализ, дисертацията съдържа следните специфични научни резултати:

- 1) Извършен е критичен преглед на аналитични потенциални функции за моделиране на експериментални данни, получени с висока разделителна способност при двуатомни молекули с цел избор на функция/функции с добри екстраполационни свойства при големи междуатомни разстояния. За подходящи са избрани моделът на Морс за големи разстояния и Чебишевото полиномиално разлагане.
- 2) За първи път са анализирани екстраполационните свойства на потенциала на Морс за големи разстояния, като се демонстрира, че могат да бъдат получени точни стойности за енергията на дисоциация, дори когато последните 10-12 енергийни нива липсват в изходните данни.
- 3) Определянето на водещия коефициент на дисперсия е по-малко надеждно в сравнение с енергията на дисоциация и се препоръчва използването на теоретичните стойности за този коефициент при големи екстраполации. Изчислено е, че дори 5% неопределеност в този коефициент оказва силно негативно влияние върху неопределеността в енергията на дисоциация.
- 4) Дисертацията за първи път разглежда как избраният модел на потенциалната енергийна крива влияе върху неопределеностите в оценките на нейните параметри. Предложена е методология за оценка на тези базирани на модела неопределености на оценените параметри. В дисертацията са включени три публикации, от които две са от Група II (Q3 и Q4), а една публикация е от Група III (SJR). Алкета Синанай е първи автор и на трите публикации – две с импакт фактор и една с SJR. Представени са три постера на международни конференции в Албания, Сърбия и Франция. Научните публикации, включени в дисертационния труд отговарят на 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 научната област 4. Природни науки и професионално направление 4.1. Физически науки. 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.

#### **4. Характеристика и оценка на преподавателската дейност на кандидата**

Докторант Алкета Синанай е участвала активно в обучението на студенти в университети в Албания. Доколкото ми е известно, тя няма преподавателска дейност в СУ „Св. Климент Охридски“.

**5. Съдържателен анализ на научните и научно-приложните постижения на кандидата съдържащи се в дисертацията**

Дисертацията, представена за рецензия, съдържа 137 страници, 1 таблица, 66 фигури и 79 цитирани източника. Дисертацията се състои от 8 глави, като Глава 1 представя кратък обзор на методологичните въпроси, свързани с решаването на обратната задача за определяне на параметрите на потенциалната функция от спектроскопските данни. Основната цел на този обзор е да формулира целите на дисертацията. Авторът е предоставил изчерпателно въведение в теорията на потенциалните енергийни криви за двуатомни молекули, разглеждайки различни предизвикателства, които възникват при апроксимация на далечната част на тези криви с помощта на експериментални данни. Тази конкретна цел е реализирана чрез включване на обширни обзорни части в Глави 2-4, които са комбинирани с критичен анализ. Този подход към представяне на резултатите от дисертацията обосновава необходимостта от по-общо изследване на екстраполационните свойства на потенциала на Морс за големи разстояния. Той допринася за по-дълбоко разбиране на методологията, предложена и разработена от докторанта за определяне на модела и параметрите на потенциалната функция. Основният принос на дисертацията е описан в Глави 5 и 6. Глави 7 и 8 представят някои заключения и приноса на автора.

Оценявам представената дисертация като безспорно научно и практическо постижение. Приносите на дисертацията могат да бъдат охарактеризирани като нови подходи за подобряване на точността при определяне на спектроскопски параметри в двуатомни молекули, обогатяване на съществуващите знания в спектроскопията на двуатомни молекули и прилагане на научни достижения в спектроскопската практика. Резултатите от дисертацията са публикувани в 3 публикации, от които две са с импакт фактор, а една е с SJR. Разпространението на резултатите включва също 3 постерни презентации на международни конференции. Досега не са забелязани цитирания. Основните постижения на дисертацията са изложени по-долу.

Глава 2 „Енергийни нива на двуатомни молекули“ представлява важна и много изчерпателна теоретична основа за методологията, предложена в дисертацията. Тази глава обхваща над 50 страници. Тя започва с много опростени модели на общата форма на всеки междуатомен потенциал за двуатомни молекули и продължава със строги методи за определяне на енергийните нива на тези молекули. Опростеният модел разглежда двуатомната молекула като вибратор и ротор и въвежда молекулни константи и коефициенти на Дънам. Анализирани са също вибрационната и ротационната спектроскопия. Строгият анализ включва Хамилтониан на двуатомна молекула и приближението на Борн-Опенхаймер. Глава 2 въвежда също потенциалната енергийна крива и се фокусира върху далечната ѝ част с възможност за аналитично описание. Обсъдени са също числени решения на едномерното радиално уравнение на Шрьодингер.

В Глава 3 „Експериментално определяне на потенциални енергийни криви (PECs)“ са анализирани и сравнени различни аналитични потенциали. Потенциалната енергийна крива е представена като функция на междуядреното разстояние и някои параметри на модела, които трябва да бъдат коригирани съответно, за да се осигури точно възпроизвеждане на експерименталните данни в рамките на тяхната неопределеност. Тъй като параметрите и експерименталните данни са свързани чрез радиалното уравнение на Шрьодингер, връзката не е линейна и съгласуването на параметрите се превръща в нетривиална задача. Анализираните потенциали включват потенциала на Морс, потенциала на Ленард-Джоунс, разширения осцилаторен модел на Морс с неговите свойства за големи разстояния, аналитичния модел на Морс-Ленард-Джоунс, модел, базиран на полиномите на Чебишев, и полиномен модел на Тиймън. За експериментално изследване на състояния с двоен минимум са разгледани сплайн форми. Акцентът на анализа е поставен върху потенциала на Морс за големи разстояния.

Глава 4 „Определяне на далечната част на потенциалните енергийни криви (PEC)“ разглежда различни подходи, предложени в последните експериментални изследвания, фокусирани върху определянето на далечната част на потенциала от експериментални данни. По-конкретно, критично са анализирани потенциални модели за основното състояние на димера Rb, основното състояние на димера Ca, основните електронни състояния на водородния халид и основното състояние на NaRb.

Глава 5 „Екстраполационни свойства на потенциала на Морс за големи разстояния“ представя изследванията, които са от решаващо значение за дисертацията. Основната задача, решена в тази глава, е оценяване на надеждността на оценката на дълбочината на потенциалната яма и водещия член в далечната област. Потенциалната крива за основното състояние на димера калций е използвана като най-подходяща за тестване. Оценката се извършва с различни подмножества на експериментални данни, като постепенно се намалява най-високото вибрационно квантово число. Трябва да се отбележи, че докторантът разработва специална програма за апроксимация с модифициран софтуер. Тя позволява апроксимацията на потенциала на Морс за големи разстояния и други популярни потенциали. Компонентът за решаване на радиалното уравнение на Шрьодингер е вграден в основната програма. Модифицираният софтуер включва подхода на сингулярно декомпозиране по стойности (SVD). Авторът доказва, че това декомпозиране е много подходящо за апроксимации, които слабо зависят от параметрите на апроксимацията. Прави се заключение, че SVD изключва от апроксимацията линейни комбинации на параметри, които слабо подобряват качеството на апроксимирането. Неопределеностите на параметрите за всяка оценена потенциална енергийна крива се оценяват, използвайки матрицата на дисперсиите и ковариациите. Включена е блок-схема на процедурата за апроксимиране с подробен опис на всички блокове. Входно-изходните (IO) операции се извършват в Python среда.

Глава 6 „Резултати“ представя резултатите от извършените апроксимации за димера Ca, избирайки потенциали, които водят до безразмерно стандартно отклонение на изчислените енергии от експерименталните данни под 0.64. Изчисленията са направени при различни стойности на максималното вибрационно квантово число и за набор от параметри на потенциала на Морс за големи разстояния. Резултатите са представени графично като точки с координати енергията на дисоциация и водещия коефициент на дисперсия, като неопределеностите на двата параметъра също са показани на графиката. Получените графични представяния характеризират зависимостта на неопределеността на енергията на дисоциация и водещия коефициент на дисперсия от модела. Резултатите доказват приложимостта на потенциала на Морс за големи разстояния и възможността да се получат добри екстраполационни резултати при липсващи последни 10-12 енергийни нива.

## **6. Критични бележки и препоръки**

Дисертацията е стъпка напред в областта на спектроскопията с висока разделителна способност на двуатомни молекули. Тя предлага ценни методологични решения и предоставя основа за по-точна екстраполация на потенциалните енергийни криви и определяне на техните параметри от експерименталните данни. Методологичното равнище е високо и предоставените анализи са полезни не само за начинаещите, но и за опитните изследователи в областта. Дисертацията е структурирана и написана до голяма степен като монография. Имам следните критични забележки и въпроси:

1.) За да отговаря на монографичния стил, обозначенията трябва да бъдат едни и същи в целия текст. Например, вибрационното квантово число не е представено по един и същи начин в различните части на дисертацията, напр. във формули (2.74) – (2.78), (2.81) – (2.83), (3.6), таблицата на страница 110 и т.н. Използвани са обозначения като  $\nu$ ,  $\nu$  или  $\nu$ . Същото важи и за обозначението на междудреното разстояние. Основните несъответствия са в Глава 6 „Резултати“, където обозначение  $\nu_{\text{max}}'$  се използва за характеризиране на резултатите от симулацията, без да бъде дефинирано в текста.

2.) Приносите на автора са по-ясни и кратки в автореферата на дисертацията.

3.) Някои важни твърдения не са обяснени в детайли, например избора на приемливи безразмерни стандартни отклонения на изчислените енергии от експерименталните данни.

4.) Дисертацията ще спечели като качество, ако бъде предоставено по-подробно описание на използваните експериментални данни.

5.) Защо симулацията на синтетични експериментални данни с метода Монте Карло е неефективна при решаване на проблема със зависещите от модела неопределености?

6.) Ефективно ли е да се разработи процедура за дълбоко обучение за извършване на висококачествени апроксимации?

#### **7. Лични впечатления за кандидата**

Не познавам кандидата лично.

#### **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 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 Али Синанай.

06.11.2024 г.

Изготвил рецензията:  .....

(проф. дфн. Елена Стойкова)