

# СТАНОВИЩЕ

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 Пейчо Стоев Петков – СУ „Св. Климент Охридски“  
Физически факултет, в качеството му 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 Али Синанай**

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

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

Кандидатът Алкета 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 и 5 на брой други документи (във вид на служебни бележки, декларации и други подходящи доказателства), покриващи постиженията на кандидата.

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**

Алкета работи като асистент-преподавател от 2016 г. до 2024 г. в университета „Александър Джувани“ в Елбасан, където нейните отговорности включват организиране на семинари, лабораторни упражнения и курсове по различни дисциплини по физика. Освен това е работила като учител по физика в няколко училища в Елбасан.

Алкета завършва гимназия „Dhaskal Todri“ в Елбасан и придобива бакалавърска степен по математика и физика от университета „Александър Джувани“. Тя продължава обучението

си по физика в университета в Тирана, а след това започва редовна доктуратура по оптика и спектроскопия в СУ „Св. Климент Охридски“ в София, България.

Алкета владее английски (IELTS B2) и италиански (C1) и ползва немски, македонски и български език. Нейните технически умения включат работа с Microsoft Office, Origin, Qti-Plot и Python.

Посетила е 4 летни училища. Участвала е в 10 международни конференции.

Алкета извършва изследвания по теми, включително концентрация на елементи в проби от околната среда и криви на потенциална енергия за двуатомни молекули, като резултатите са публикувани в списания като Journal of Molecular Spectroscopy, Acta Physica Polonica и RAD Conference Proceedings.

Автобиографията на Алкета подчертава нейния опит в обучението по физика, активни изследвания в областта на спектроскопията и непрекъснатата ангажираност с научната общност.

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

Научните постижения на г-жа Алкета Синанай могат да бъдат обобщени въз основа на представената от нея дисертация, в която се изследват екстраполационните свойства на потенциала на Morse-Long Range (MLR) при големи междуядрени разстояния. По-конкретно, работата на кандидата е съсредоточена върху анализиране на кривите на потенциалната енергия (PEC) на двуатомни молекули, с цел постигане на точна екстраполация при големи междуядрени разстояния и оскъдни експериментални данни.

Изследванията, включени в дисертацията, са публикувани в две публикации с импакт фактор и една с SJR. Основните резултати са публикувани в статиите A. Sinanaj and A. Pashov, Extrapolation properties of the Morse-Long Range potential at large internuclear Distances, J. Mol. Spectrosc. 396, 111811 (2023), Q3, IF 1.4. и A. Pashov and A. Sinanaj, “Extrapolation properties of the Chebyshev-Polynomial-Expansion potential”, Acta Phys. Pol. A, vol. 146, no. 3, p. 259, Sep. 2024, doi: 10.12693/AphysPolA.146.259., Q4, IF 0.5. Изследванията са докладвани на 11th International Conference of the Balkan Physical Union и са представени постери на три международни конференции. Научните публикации, включени в дисертационния труд отговарят както на минималните национални изисквания (по чл. 2б, ал. 2 и 3 на ЗРАСРБ) и така на допълнителните изисквания на СУ „Св. Климент Охридски“ за придобиване на образователната и научна степен „доктор“ в професионално направление физически науки и даже ги надвишават;

Според представената декларация за авторство научните разработки, представени в дисертацията са оригинални и не са използвани в други процедури за присъждане на научната и образователна степен „доктор“.

Представените протокол и становище от процедурата за проверка за плагиатство установяват, че такова не е налично.

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

*Няма такива изисквания към кандидата. Няма количествени данни в представените документи.*

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

Дисертацията представя цялостен научен принос в спектроскопията и молекулната физика, като се фокусира върху екстраполационните свойства на потенциала на Morse-Long Range (MLR) при големи междуядрени разстояния. Работата на кандидата основно включва разработване на нови методи и подобряване на съществуващи модели за криви на потенциална енергия (PECs) на двуатомни молекули, повишаващи прецизността на прогнозите по отношение на молекулните взаимодействия и спектралните характеристики.

Дисертацията на Алкета Синанай е добре структурирана и богато илюстрирана. Прави се задълбочено въведение в моделите за описание на двуатомни молекули. Изследванията са описани изчерпателно, като това се отнася и за използвания математически апарат.

Приносите на кандидата включват разработването на нови модели и методи, по-специално модел, базиран на потенциала MLR с екстраполационни свойства на големи разстояния. Това отговаря на необходимостта от точни PEC на големи разстояния и представлява подобрене в теоретичните подходи в областта молекулната спектроскопия, позволявайки конструирането на по-прецизни PEC за междуядрени разстояния, при които известните в литературата модели имат недостатъци, особено при липсата на точни експериментални данни. Работата разширява познанията в областта на молекулната спектроскопия, като предоставя позадълбочена представа за молекулните взаимодействия на големи разстояния, разширявайки съществуващите теории чрез модели с подобрени екстраполационни свойства.

Приносите на кандидата имат както научен така и приложен характер. В работите на Алкета Синанай се въвеждат усъвършенствани техники за моделиране на PEC, които са пряко приложими. Разработен е подход за мотивирано ограничаване на параметричното пространство при апроксимиране на експериментални данни с различна точност. Казано по-конкретно, MLR потенциалите могат да бъдат касифицирани според стойностите на въведените четири параметъра  $r_{ref}$ ,  $p$ ,  $q$  и  $N$  като резултат от изследванията се дават препоръки за избиране на стойностите им и процедура за напасване всички параметрите на MLR. Демонстрираните резултати имат и практически приложения, тъй като такива методи са полезни за изчисляване на скорости на фотоасоцииране, дължини на разсейване и други съществени молекулни характеристики. По този начин изследванията на кандидата предлагат ценни инструменти както за експериментални, така и за теоретични разработки.

Изследванията, описани в дисертационния труд на Алкета Синанай са публикувани основно в две работи (Q3 и Q4) с единствен съавтор научния ръководител, като индивидуалният принос на кандидата е ясно посочен както в публикациите така и в дисертацията и е с фо-

кус върху разработването и прилагането на модела MLR, особено при прилагането на процедурата по определяне на параметрите за постигане на точно моделиране на кривите на потенциалната енергия.

Като цяло, дисертацията демонстрира балансирана комбинация от теоретични разработки и практически приложения в рамките на молекулната физика и спектроскопията. Тази комбинация подчертава научната и практическата стойност на постиженията на кандидата, които създават добра основа за по-нататъшно развитие.

## 6. Критични бележки и препоръки

*Посочват се критични бележки по дисертационния труд и Автореферат по отношение на: постановка; анализи и обобщения; методично равнище; точност и пълнота на резултатите; литературна осведоменост.*

Нямам особено критични бележки по съдържанието и структурата на дисертационния труд и авторефератите, но се забелязват печатни грешки. Освен това дисертационният труд би спечелил от още по-задълбочен анализ на систематичните и моделните неопределености.

Имам следните въпроси към кандидата:

Един от резултатите на изследванията е, че „MLR потенциалите могат да бъдат разделени на класове с различни стойности на  $r_{ref}$ ,  $p$ ,  $q$  и  $N$ “. Вие определяте, че „ $p$  и  $q$  трябва да са малки цели числа и  $p + 6$  не трябва да е по-малко от 10 (6 е степента на водещия коефициент на дисперсия  $C_6$ , 10 – степента на последния коефициент,  $C_{10}$ )“ като това е определено за  $Ca_2$ . За кой двуатомни молекули са приложими тези стойности?

В заключителната част на дисертация се казва „В настоящия случай на  $Ca_2$ , допускането на 5% неопределеност в теоретичния  $C_6$  автоматично ще намали неопределеността в  $D_e$  от  $\pm 2 \text{ cm}^{-1}$  до около  $\pm 1 \text{ cm}^{-1}$  за  $\nu''_{max} = 30$ .“ и освен това, както добре е обяснено в дисертацията тези параметри за доста корелирани. Може ли да кажете дали сте изследвали възможността да бъде изведена по-обща зависимост между качеството на данните, теоретичната неопределеност на  $C_6$  и точността, с която може да бъде определена  $D_e$ ? Ако не може да бъде изведена такава зависимост, то каква е причината?

## 7. Лични впечатления за 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 професионал-

ното 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 (физика на атомите и молекулите) на Алкета Синанай

05.11.2024 г.

Изготвил рецензията: .....

(доц. д-р Пейчо Петков)