

## СТАНОВИЩЕ

на дисертационен труд

за придобиване на образователната и научна степен „доктор“

в професионално направление 4.1 Физически науки,

по процедура за защита във Физическия факултет на СУ Св. Климент Охридски

Становището е изготвено от: проф. дфзн Асен Енев Пашов, СУ „Св. Климент Охридски“, Физически факултет, в качеството му на член на научното жури съгласно Заповед № РД20-1308/31/07/2023 г. на Ректора на Софийския Университет.

**Тема на дисертационния труд: “ Coupled-channels modelling of perturbed electronic states in diatomic molecules”**

**Автор на дисертационния труд: Илвие Хавальова**

### Данни за кандидата

Илвие Хавальова получава бакалавърска и магистърска степен във Физическия факултет на СУ Св. Климент Охридски през 2014 г. и 2016 г. съответно. От 2017 г. тя е задочен докторант в същия факултет с ръководител проф. Асен Пашов.

### Обща характеристика на научните постижения на кандидата

Работата на докторанта е в областта на физиката на двуатомните молекули и по-специално описанието на техните спектри в условията на силни пертурбации. Това е актуална задача, защото описанието на такива спектри е сложно, изисква както нетривиални компютърни алгоритми, така и умения в тяхното интерпретиране. До скоро подобни задачи са решавани локално, като се свеждат до така наречения ефективен Хамилтониян. Основните недостатъци при това са ограничаването на пространството от състояния до няколко вибрационни нива и представянето на матричните елементи на операторите чрез изрази, включващи ефективни параметри. Въпреки, че често такива модели са успешни, те не могат да предсказват надеждно енергии на нива, извън рамките на модела, и не могат да пресмятат интензитети на спектралните линии, защото в тях липсва информация на радиалната част на вълновата функция.

От около 2000 г. се появяват публикации, където пертурбации се описват с глобални модели, базирани на система от свързани радиални уравнения на Шрьодингер. Веднага се виждат техните предимства, но тяхното приложение е ограничено, защото използваните програмни кодове не са общодостъпни, а и не са универсални и за всяко отделна задача се модифицира съществуващ код.

Още по време магистратурата пред Илвие Хавальова беше поставена задача да се запознае с методите за глобално описание на пертурбациите и напише програмен код, който да е универсален и да може да бъде приложен при голямо разнообразие от задачи. Допълнително, кодът трябва да е в състояние не само да реши системата от свързани уравнения на Шрьодингер, но да оптимизира част от радиалните функции (потенциални криви, матрични елементи на спин-орбиталното взаимодействие и т.н.) така, че пресметнатите енергии да са максимално близки до експерименталните.

Бяха написани няколко версии на програмата, като всяка една беше тествана и усъвършенствана върху конкретен пример. Първоначално това беше системата от състояния  $^1\Pi_u$  и  $^1\Sigma^+_u$  в  $Rb_2$ , свързани с ротационни пертурбации. Успешното решаване на тази задача (публикация в J. Quant. Spectrosc. and Rad. Transf. през 2018 г.) ни мотивира да атакуваме системата от три свързани състояния в  $NiH$ , така наречения супермултиплет -  $^2\Delta$ ,  $^2\Pi$  и  $^2\Sigma^+$ . Задачата е значително по-сложна, необходимо е да се отчетат не само ротационни, но и спин-орбитални взаимодействия, които по големина са съизмерими с вибрационните константи на състоянията. Експерименталните данни са сравнително малобройни, което затрудни решаването на обратната задача. На този етап разработвания код претърпя най-много промени. Успешното решаване на тази задача (публикация в J. Quant. Spectrosc. and Rad. Transf. през 2021 г.) едновременно доведе до написването на стабилен и универсален код, който да може да пресмята енергетичната структура на свързани молекулни състояния.

Последната задача, с която докторантът успешно се справи е, добавянето на възможност за пресмятане на интензивността на спектралните линии при известни матрични елементи на оператора на диполния момент. Програмата беше тествана за описание експериментално наблюдаваните „аномалии“ в интензивностите на преходите между възбуденото състояние в  $KCs E^1\Sigma^+$  и свързаните със свръхфино взаимодействие състояния ( $X^1\Sigma^+$ ,  $a^3\Sigma^+$ ) (публикация в J. Quant. Spectrosc. and Rad. Transf. през 2022 г.).

### **Лични впечатления**

През годините съвместна работа Илвие Хавальова се показва като изключително ерудиран учен, способен да вникне в детайлите на проблемите. Винаги се е стараела сама да намери правилното решение, рядко приема твърдения наготово, проверява формули, дадени без извод, често открива неточности в утвърдени източници. Такъв един подход забавя темпото на работа, но същевременно води до проверени и надеждни резултати. Така разработеният от докторанта код е свободно достъпен за ползване, което демонстрира увереността на автора, че след като е преминал през множество тестове и изпитания, той може да се ползва и от други учени.

Самият код е най-видимият резултат от работата на докторанта. Неговото създаване, обаче, би било невъзможно без задълбоченото познаване на структурата на молекулите, което по мое мнение е на много високо ниво. Тази комбинация от знания позволи докторантът в голяма степен самостоятелно да измине пътя от експерименталните данни, през тяхната обработка, написване на код, създаване и оптимизиране на модел и да достигне до написването на научна публикация.

### **Заклучение**

Работата е извършена на много добро професионално ниво. Демонстрирани са солидни знания в областта на физиката на двуатомните молекули, числените методи и програмирането. Авторефератът отразява съдържанието на дисертацията.

Достиженията и представените материали на Илвие Хавальова покриват минималните научни изисквания на ЗРАС, Правилника към него и препоръчителните изисквания на Физическия факултет. Подкрепям присъждането на образователната и научна степен „Доктор“.

27.10.2023

София