

СТАНОВИЩЕ

върху дисертационния труд, озаглавен „**Моделиране на пертурбирани електронни състояния в двуатомни молекули чрез свързани канали**”, с автор **Илвие Хавальова**, представен за придобиване на ОНС „Доктор” по професионалното направление 4.1 Физически науки (Физика на атомите и молекулите)

от **проф. дфзн Виктор Иванов**, председател на научното жури

1. Актуалност на проблема и мотивация за представените изследвания

Квантовомеханичното описание на двуатомните молекули е от първостепенно значение в редица съвременни научни области – астрофизика, физика на плазмата, лазерна физика, физика на свръхохладените атомни и молекулни снопове и др. Точността на данните от съвременните оптични спектроскопски методи е толкова висока, че тяхната теоретична интерпретация изисква квантовомеханично описание, излизашо извън традиционното адиабатно приближение. Методът на свързаните канали (МСК) е съвременен теоретичен подход, който позволява до бъде отчетено смесването на електронните, вибрационните и ротационните степени на свобода на двуатомна молекула с контролируема точност, зависеща от големината на използвания базис от електронни състояния. Приложението на МСК обаче е ограничено от твърде оскъдните софтуерни приложения, използващи този метод.

Предвид казаното по-горе, авторът формулира ясно и убедително целите на представените в дисертацията изследвания:

- Разработване на софтуер с общо предназначение, който да решава уравнението на Шрьодингер за ядреното движение в двуатомна молекула въз основа на МКС. Като основно изискване към софтуера авторът поставя и неговата многофункционалност, а именно възможности за: (i) пресмятане със спектроскопска точност на енергиите и интензивностите на преходите в молекулата по зададени потенциални криви на адиабатните електронни състояния; (ii) фитиране на параметрите на потенциалните криви по известни спектроскопични данни.
- Приложение на разработения софтуер към високовъзбудените състояния на молекулите Rb_2 и NiH , за които се очаква съществено смесване на адиабатните електронни състояния.

2. Структура на дисертацията

Дисертацията е написана на английски на 189 страници и е структурирана в девет глави, списък на използваната литература и две приложения. Материалът е илюстриран с 46 фигури, а данните от изчисленията са представени в 16 таблици. Графичното оформление е на високо професионално ниво.

Уводът е сравнително малък по обем, но достатъчно информативен. Според мене авторът успява убедително да представи мотивацията за планираните изследвания на фона на съвременното състояние на проблема. В главите от втора до пета в детайли е развита квантовомеханичната теория на двуатомните молекули, като се започне от най-грубото адиабатно приближение и се стигне до метода на свързаните канали. Оригиналните резултати на дисертацията са представени, както следва: описание на разработения софтуер в глава 6, резултатите от приложението на софтуера за молекулата Rb_2 в глава 7 и за молекулата NiH – в глава 8. Последната, девета глава, включва заключенията от работата и основните приноси на автора в представените изследвания.

Кодът на разработения от автора софтуер DiAtomic е написан на програмния език Python и е публично достъпен в GitHub. В приложение към дисертацията е даден примерен програмен интерфейс за стартиране на пресмятанията за три двуатомни молекули – CO , Rb_2 и NiH .

Авторефератът е написан на български и отразява пълно съдържанието и основните изводи от дисертацията.

3. Основни научни приноси на докторанта

Без съмнение основният научен принос на докторанта е разработването на софтуера за решаване на системата уравнения МСК. Описаният в глава 6 алгоритъм показва, че докторантът познава в дълбочина физиката на двуатомните молекули, а също така владее професионално основните числени методи в линейната алгебра. Програмата позволява гъвкаво използване на различни типове електронни базисни функции – Фурие и sinc, различни апроксимации за адиабатните потенциални криви в различните канали – на Морз, чрез кубичен сплайн и т.н. Освен определяне на енергетичните нива и собствените функции, програмата позволява и пресмятане на относителните интензивности на оптичните преходи в молекулата, което е от изключителна важност при сравняване на теоретичните резултати с данните от експеримента.

С помощта на програмата е направен изцяло квантовомеханичен анализ на две интересни двуатомни молекули – Rb_2 и NiH , като е получен и документиран значителен брой неописани досега в литературата оптични преходи. Чрез МСК са оптимизирани и потенциални криви за двете молекули, които прецизират известните досега адиабатни потенциални криви, получени чрез квантовохимични пресмятания от първи принципи. Демонстрирано е отлично съответствие между резултатите, получени чрез МСК, и експерименталните данни за честотите и интензитетите на линиите на флуоресценция, като съвпадението е от порядъка на 10^{-2} cm^{-1} , т.е. на границата на неопределеността на експеримента.

Дисертацията се основава на три публикации – две в реномираното специализирано списание *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* (Q1/Q2, IF=2.3) и една в

AIP Conference Proceedings (SJR). Резултатите от изследването са представени и на четири международни конференции. И в трите статии, както и в изнесените доклади, кандидатът е водещ автор.

Нямам съмнение относно оригиналния принос на докторанта към представените в дисертацията и в публикациите изследвания и не са налице каквито и да било индикации за плагиатство. Приносът на докторанта е конкретизиран експлицитно и в публикацията I. Navaluyova, A. Pashov, P. Kowalczyk, J. Szczepkowski and W. Jastrzebski, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 202, 328-34 (2017).

4. Забележки и препоръки

Дадените по-долу критични бележки в никакъв случай не намаляват научните достойнства на дисертацията, а имат по-скоро стилистичен и презентационен характер.

- 1) По моя лична преценка първите пет уводни глави на дисертацията може да бъдат намалени до обем, съпоставим с този в автореферата, като за по-детайлните математически изводи да бъдат дадени само препратки към оригиналните публикации или да бъдат изведени в приложение. Твърде обемистата обща част в известна степен „маскира” оригиналния принос на автора и прави дисертацията доста тежко четиво за неспециалисти в молекулната спектроскопия.
- 2) Струва ми се, че програмата DiAtomic може да бъде по-добре документирана, както в дисертацията, така и в GitHub. Въпреки дадените примерни скриптове за трите молекули – CO, NiH и Rb₂, липсват конкретни указания за структурата на драйверния скрипт и за формата на входните файлове с физични данни, така че външен потребител да може да използва пълноценно програмата в своята работа.

От гледна точка на перспективите за бъдещо развитие на докторанта, бих препоръчал да бъдат потърсени научни контакти с групи в областта на квантовохимичните пресмятания, които да предоставят прецизни данни за адиабатните потенциални криви. Би могло да се помисли и за интегриране на програмата в популярни квантовохимични софтуерни пакети с отворен код.

5. Въпроси към докторанта

- 1) Какви са предимствата на програмата DiAtomic в сравнение с публикувания по-рано софтуер DUO (Yurchenko 2016).
- 2) Потенциалът на Морз допуска точно квантовомеханично решение. Биха ли се облекчили пресмятанията в МСК, ако се използва базис от известните аналитични вълнови функции за този потенциал, вместо Фурие или sinc базис?

6. Заключение

Въз основа на представения дисертационен труд, обема и качеството на извършената от докторанта работа, пълното съответствие между приложените публикации и наукометричните критерии на Физическия факултет, подкрепям убедено да бъде присъдена на Илвие Хавальова образователната и научна степен „Доктор” в ПН 4.1 Физически науки (Физика на атомите и молекулите).

София, 3 октомври 2023 г.

Изготвил становището:

/проф. дфзн. Виктор Иванов/