

## СТАНОВИЩЕ

относно дисертация

за придобиване на образователната и научна степен „доктор“

в професионално направление 4.1 Физически науки,

по процедура за защита във Физическия факултет на Софийския университет „Свети

Климент Охридски“

Становището е изготвено от: проф. д-р хаб. Włodzimierz Jastrzębski от Института по физика на Полската академия на науките, в качеството му на член на научното жури съгласно Заповед № РД 38-469/23.07.2024 на Ректора на Софийския университет.

Дисертационен труд на тема: „ Екстраполационни свойства на потенциала на Морз-Дългия диапазон при големи междуядрени разстояния“

Автор на дисертационния труд: Алкета Синанай

Дисертационният труд е изготвен под ръководството на проф. дфзн Асен Пашов и доц. д-р Снежана Йорданова

### **Данни за докторанта**

Г-жа Алкета Синанай е родена в Елбасан, Албания, на 13 февруари 1992 г. и има двойно, албанско и българско гражданство. Завършила е Факултета по природни науки на Университета „Александър Кшувани“ в Елбасан (2011-2014 г.), а след това и Физическия факултет на Тиранския университет (2014-2016 г.). От 2016 г. до 2024 г. работи като асистент-преподавател в Университета „Александър Кшувани“, Елбасан. От 2019 г. до 2024 г. е докторант в Катедрата по оптика и спектроскопия на Софийския университет 'Свети Климент Охридски'. През това време тя публикува две научни статии в списания от т.нар. филиделфийски списък и свързани с темите на докторската ѝ дисертация.

### **Общо описание на научните постижения на докторанта.**

Най-общо казано, предмет на дисертацията е описанието на електронните състояния на двуатомни молекули с помощта на различни модели на криви на потенциалната енергия (КПЕ). Но от особен интерес за автора е описанието на далечните части на КПЕ, за междуядрени разстояния, по-големи от радиуса на Лерой.

Намирам, че изборът на такава тема е много подходящ и актуален, със сигурност не е изследвана задълбочено в литературата. А тя е много важна и представлява интерес не

само за спектроскопията. Взаимодействията на големи разстояния определят свойствата на свръхстудените атоми и молекули, възможността за охлаждане чрез изпарение и предаване на охлаждането, производство на студени молекули чрез фотоасоциация и като цяло определят свойствата на ударите, които водят и до декохерентност на квантовите състояния, което е от особена важност поради приложенията в бъдещите квантови технологии.

Дисертацията има класическа структура: глави 1 - 3 представляват много добро въведение в по-нататъшните разсъждения. В допълнение към доста подробното описание на енергетичната структура на молекулите (глава 2), много ми харесва прегледът на възможностите и ограниченията при експерименталното определяне на КПЕ (глава 3). Това е една много зряла форма на дискусия, чета я с удоволствие. Тук особено важно е сравнението на различните модели на КПЕ, като се започне от потенциала на Морз, потенциала на Ленард-Джоунс и се стигне до потенциала на MLR и сплайн.

В следващата глава 4 авторът представя литературни примери за определяне на далечната част на КПЕ за основните състояния на избрани молекули:  $Rb_2$ ,  $Ca_2$ ,  $NaRb$  и някои водородни халогениди (например  $HF$ ,  $HCl$  и други подобни). Във всяка от цитираните и разгледани в глава 4 статии е използвана малко по-различна стратегия за определяне на КПЕ на дълги разстояния. Този литературен преглед е прелюдия към собствените числени експерименти на автора за основното състояние на  $Ca_2$ , представени в глава 5. Извършените симулации са позволили да оцени, наред с други неща, неопределеността на напасваните параметри в зависимост от разстоянието на екстраполация. А в настоящия случай на  $Ca_2$ , е възможно да се формулира надежден критерий за оценка на качеството на потенциалната крива. Това е съгласието с наличните в този случай експериментални данни. Най-често от експеримента не разполагаме с енергиите най-високо разположените вибрационни нива, така че оценката на това колко голяма грешка допускаме при екстраполацията на КПЕ за далечни нива е от решаващо значение. Изводите от тези числени експерименти ще бъдат приложими и в ситуации, в които не разполагаме с положенията на тези високовъзбудени състояния и можем само да екстраполираме техните енергии. А това е най-честият случай в практиката, най-малкото поради малките фактори на Франк-Кондон.

Според мен това е най-ценният резултат, получен от г-жа Синанай, и мисля, че той ще бъде използван в бъдещи изследвания на потенциалите при големи разстояния.

### **Критични забележки**

Единствените въпроси, които възникнаха при четене на дисертацията са следните:

- защо са проведени числени експерименти само за една молекула, докато в глава 4 са докладвани КПЕ за няколко молекули;

- дали представените числени симулации могат да бъдат приложени и за електронни състояния със свръхфина структура (напр. при взаимодействия между синглетни и триплетни състояния на алкалните атоми);
- по-общо, дали такива анализи може да се извършват в състояния, в които се наблюдават пертурбации.

### **Други забележки**

Езикът на дисертацията е ясен. Не съм забелязал съществени езикови грешки, все пак не съм носител на езика. Нямам съществени критични бележки и препоръки.

Заслужава да се отбележи, че извършването на числените експерименти е изисквало изпълнението на няколко хиляди симулации.

### **Заклучение**

Дисертационният труд на Алкета Синанай, авторефератът и научните публикации отговарят на стандартните изисквания за докторска дисертация. Кандидатът отговаря на националните изисквания в областта, както и на изискванията на Физическия факултет, а в дисертацията не е установено плагиатство. Подкрепям присъждането ѝ на образователната и научна степен „доктор“.

