

СТАНОВИЩЕ

от проф. д.н. Даниела Борисова, ИИКТ-БАН

Относно: Дисертационен труд на Росен Михов Михов,
на тема „Монте Карло подход за оптимизация на биметални наноструктури“,
представен за придобиване на образователната и научна степен „доктор“
в професионално направление 4.6 „Информатика и компютърни науки“,
докторска програма „Информатика“

Съгласно заповед № 303/28.11.2025 на Директора на ИИКТ-БАН съм избрана за член на научно жури, а на първото заседание на научното жури, състояло се на 02.12.2025 г., съм определена да подготвя становище по процедурата.

АКТУАЛНОСТ

Разработването на надеждни и екологични методи за синтезиране на метални наночастици е ключова стъпка в развитието на областта на нанотехнологиите. През последните години се забелязва значителен интерес към разработването на наночастиците от благородни метали като злато и сребро, поради техните различни биологични, химични и физични характеристики. Наночастиците с няколко хиляди атома са едни от най-трудните за числово моделиране, тъй като наночастицата е прекалено малка и не са приложими методи за моделиране на макроскопични метали, но от друга страна наночастицата е прекалено голяма за да се използват методите, базирани на квантовата физика. Поради това, числовото моделиране на наночастици остава актуален проблем, за който се търсят различни пътища за синтез и охарактеризиране свойствата на подобни наноструктури.

ПОЗНАВАНЕ НА ИЗСЛЕДВАНИЯ ПРОБЛЕМ

От направения обзор, както и от публикуваните резултати по темата на дисертационния труд, лесно може да се установи, че докторантът е добре запознат с естеството на изследваната проблематика. Допълнително доказателство за това е броят на използваните литературни източници, броя публикации и цитиранията към тях.

АНАЛИТИЧНА ХАРАКТЕРИСТИКА

Дисертационният труд е в общ обем от 124 страници, съдържа 34 фигури, 7 таблици и 149 литературни източника. Структуриран е както следва: увод, 6 глави, заключение – резюме на получените резултати, приноси, списък на публикации по дисертационния труд, списък на забелязани цитирания на публикациите, участие в научноизследователски проекти, декларация за оригиналност на резултатите и библиография. Целта на

дисертационното изследване е формулирана на стр. 25, за реализирането на която са формулирани допълнително 6 задачи.

В Глава 1 са анализирани съществуващи методи за моделиране на атомните конфигурации на метални и биметални наноструктури. Представена е задачата за моделиране на атомните конфигурации като задача за глобална оптимизация, използвайки функция за потенциална енергия, както и Монте Карло симулацията като основен инструмент за реализиране на конфигурации.

В Глава 2 е описан предложения двуетапен Монте Карло подход за оптимизация на биметални наноструктури. Този подход е реализиран чрез математически модел, три алгоритъма и някои предпоставки за тяхната програмна реализация. Предложен е метод с 2 етапа – първият етап се базира на симулирано закаляване върху широка решетка, а вторият – на симулирана дифузия.

В Глава 3 са представени резултати от числовото тестване на предложения двуетапен метод с различни съотношения за разделяне на изчислителните ресурси между двата етапа и експериментално е обоснован подхода за определяне на параметрите на метода.

В Глава 4 са описани резултати от изследване влиянието на началната температура върху работата на Монте Карло алгоритъма за широка решетка, който е съставна част от предложения двуетапен метод. Тестваните наночастици от Ag и Co с различни размери, върху решетки от различен вид и с различни размери показват как различните фактори влияят върху избора на начална температура за симулирано закаляване.

В Глава 5 са представени резултати от приложението на двуетапния метод за изследване атомното подреждане и процесите на повърхностна сегрегация в Au-Ag наноклетки от 3000 атома. Чрез сравнителен анализ на резултатите за различни съотношения Au:Ag и кристални решетки с различни симетрии и е показано как взаимодействието на тези фактори предопределя локалния порядък и влиянието им върху макроскопичните свойства на биметалните наноклетки.

В Глава 6 е описана софтуерна система чрез която са реализирани числените симулации на двуетапния метод.

ОБЕКТ И МЕТОДИКА НА ИЗСЛЕДВАНЕТО

Обект на научното изследване са биметални наноструктури, а предмет на изследването са методите за оптимизация на тези структури. Използваната методика основаваща се на анализ, синтез, сравнение, обобщение, и експериментални изследвания е подходящо избрана и допринася за реализиране поставената цел и на формулираните в дисертационния труд задачи.

АВТОРЕФЕРАТ И АВТОРСКА СПРАВКА

Представените автореферати на български и английски език, отразяват достоверно съдържанието на дисертационния труд и съответстват на изискванията на ЗРАСРБ и ППЗРАСРБ. От представената декларация за оригиналност, както и от публикациите по темата на дисертацията, може да се определи, че описаните резултати са лично дело на автора.

ОЦЕНКА ЗА СЪОТВЕТСТВИЕ С МИНИМАЛНИТЕ НАЦИОНАЛНИ ИЗИСКВАНИЯ И С ДОПЪЛНИТЕЛНИТЕ ИЗИСКВАНИЯ ПО ЧЛ. 1А, АЛ. 2 ОТ ППЗРАСРБ

Представени са общо 4 публикации по темата на дисертационния труд. Всичките публикации са индексирани в Scopus, като 3 от тях са SJR, а в 3 от тях докторантът е първи автор. Представените публикации по темата на дисертационното изследване напълно удовлетворяват изискванията за придобиване на ОНС „Доктор“, тъй като от изискуемите 30 точки докторантът има 72 точки.

Резултатът от проверката за плагиатство от сайта strikeplagiarism.com, показва следните резултати: Коефициент за сходство 1: 1,76% и Коефициент за сходство 2: 0,15%.

ПРИНОСИ НА ДОКТОРАНТА

Приемам формулираните от докторанта приноси, които оценявам като научно-приложни приноси.

КРИТИЧНИ ЗАБЕЛЕЖКИ И ПРЕПОРЪКИ

Дисертационният труд е добре балансиран. Добре би било части от софтуерната реализация да се представят в отделно приложение, а в текста само схематично да се представят техните функционални особености – като например фигурите от 6.1 до 6.6.

Към докторанта имам следните въпроси: Как се постига високото ниво на оптимизиране ефикасността на изчисленията? С кои външни приложения за анализ и визуализация е съвместима предложената софтуерна архитектура?

ЗАКЛЮЧИТЕЛНА КОМПЛЕКСНА ОЦЕНКА

Получените резултати по темата на дисертационното изследване убедително показват, че Росен Михов Михов притежава необходимите теоретични знания и практически умения в областта на информатиката и компютърните науки, както и доказани способности за самостоятелни научни изследвания. Представеният дисертационен труд отговаря на изискванията на Закона за развитието на академичния състав в Р. България, Правилника за неговото прилагане, както и на Правилника за специфичните условия за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в ИИКТ-БАН. Получените резултати по темата на дисертационното изследване ми дават достатъчно основание да дам категорично положителна оценка на представения дисертационния труд и предлагам на уважаемото Научно жури да присъди на Росен Михов Михов образователната и научна степен „доктор“ по докторска програма „Информатика“, професионално направление 4.6. „Информатика и компютърни науки“.

05.01.2026

Член на Научно

НА ОСНОВАНИЕ

ЗЗЛД