

## СТАНОВИЩЕ

от проф. д-р Васил Гуляшки

**Относно:** Дисертационен труд на РОСЕН МИХОВ МИХОВ на тема „Монте Карло подход за оптимизация на биметални наноструктури” по докторска програма „Информатика”, професионално направление 4.6 „Информатика и компютърни науки”.

Със заповед № Заповед № 303 /28.11.2025г. на директора на ИИКТ – чл.-кор. д.м.н. Светозар Маргенов - във връзка с процедурата за придобиване на образователната и научна степен „доктор“ по професионално направление 4.6 Информатика и компютърни науки, докторска програма „Информатика” от Росен Михов Михов с дисертация на тема „Монте Карло подход за оптимизация на биметални наноструктури“ съм включен в състава на Научното жури.

Като член на научното жури съм получил:

1. Дисертация за присъждане на образователна и научна степен „доктор“ на български език.
2. Автореферат на български език.
3. Автореферат на английски език.
4. Научни публикации във връзка с дисертацията.
5. Други документи.

При оценката на дисертационния труд, определящи са условията на Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ), ППЗРАСРБ (Постановление No. 26 от 13 февруари 2019 г.) и Правилника на ИИКТ за прилагане на Закона за развитието на академичния състав в Република България.

1. Съгласно чл. 27 (1) от ЗРАСРБ "дисертационният труд трябва да съдържа научни или научноприложни резултати, които представляват оригинален принос в науката. Дисертационният труд трябва да показва, че кандидатът притежава задълбочени теоретични знания по съответната специалност и способности за самостоятелни научни изследвания".
2. Според чл. 27 (2) от ЗРАСРБ дисертационният труд трябва да бъде представен във вид и обем, съответстващи на специфичните изисквания на първичното звено. Дисертационният труд трябва да съдържа: заглавна страница; съдържание; увод; изложение; заключение – резюме на получените резултати с декларация за оригиналност; библиография.

Научен ръководител на дисертацията е проф. д-р Леонид Кирилов.

### Актуалност на темата

Темата на дисертацията е много актуална. Моделирането на наночастици и оптимизацията на биметални структури с цел намиране на стабилни атомни конфигурации е важна област на изследвания поради многобройните му приложения в редица области като медицина, биомедицина, криобиология и репродуктивна медицина, стоматология, сензорни приложения, наноелектроника, телекомуникации, информационни технологии, оптика,



физика и технологии на комплексни кристали, екология и опазване на околната среда, и др. Голям брой изследователи усилено работят в тази сфера. Настоящата дисертация е включена и представлява част от по-широко изследване на наноструктури, което се провежда в международен мултидисциплинарен колектив.

## ОБЩА ХАРАКТЕРИСТИКА НА ДИСЕРТАЦИОННИЯ ТРУД

Предоставеният ми за становище дисертационен труд е в обем от 124 страници, структуриран в увод, 6 глави, заключение, приноси, списък на публикациите, списък на забелязаните цитирания, декларация за оригиналност на резултатите и библиография от 149 литературни източника. В текста му са включени 34 фигури и 7 таблици.

**Целта на дисертационния труд** е да се разработи Монте Карло подход със симулирано закаляване, използващ потенциала на силно свързване, за оптимизация на различни видове биметални наноструктури, включително наночастици, наножици и нанофилми.

За постигането на тази цел са дефинирани следните задачи за изпълнение:

- 1) Да се предложи метод за оптимизация на биметални наноструктури, включително наночастици, наножици и нанофилми;
- 2) Да се изследва ефективността на предложения метод;
- 3) Да се предложи подходящ начин за определяне и регулиране на параметрите на метода;
- 4) Да се определи кои от следните фактори влияят най-съществено върху оптималния избор на начална температура на симулирано закаляване: химичният елемент, размерът на наночастицата, видът на решетката, големината на решетката;
- 5) Да се предложи софтуерна архитектура и да се разработи софтуерна система, реализираща новия метод, която да позволява високо ниво на оптимизиране ефикасността на изчисленията, гъвкавост за вариране на алгоритмите и техните параметри и добра съвместимост с външни приложения за анализ и визуализация на резултатите;
- 6) Да се направи изследване, прилагащо предложения метод за конкретен клас златно-сребърни наноклетки с 3000 атома, които представляват интерес за много приложения, за да се установи как разликите в съотношението Au:Ag и симетрията на кристалната решетка влияят върху атомното подреждане и процесите на повърхностна сегрегация.

Формулираните цел и задачи имат научен и научно-приложен потенциал за изследвания и приложение в областта на информатиката, информационните системи и технологии.

По дисертационния труд са представени 4 публикации, от които една е в сборник с доклади на международна научна IEEE конференция, а 3 са в научни списания с импакт ранг (SJR). Всичките публикации са в съавторство, но в 3 от тях Росен Михов е първи автор. До момента те имат забелязани 7 цитирания. Тези публикации покриват и надхвърлят изискванията за присъждане на образователната и научна степен „Доктор“. Представените публикации дават основание да се приеме, че изследването има необходимата публичност.

## ПРИНОСИ

Приносите са формулирани както следва:

1. Предложен е двуетапен решетъчен Монте Карло метод за оптимизация на биметални наноструктури, включително наночастици, наножици и нанофилми, с първи етап симулирано закаляване върху широка решетка и втори етап симулирана дифузия.



Методът се реализира с помощта на структури от данни и стратегия за предварителна обработка, които значително повишават ефикасността му, и позволяват да се оптимизират наноструктури от няколко стотици до няколко хиляди атома на стандартен персонален компютър.

2. Експериментално е установено, че за разпределянето на изчислителните ресурси между двата етапа на метода ефективна стратегия представлява да се използва 30% от времето за първия етап и 70% от времето за втория етап.
3. Експериментално е установено, че конкретният начин, по който методът е формулиран в 5 стъпки, е уместен и води до успешно регулиране на параметрите.
4. Изследвано е влиянието на началната температура върху работата на широкорешетъчния Монте Карло алгоритъм при различни решетки и химични елементи. Експериментално е установено, че за избирането на подходяща начална температура, най-важен фактор е размерът на решетката, като най-високи температури се изискват при поставянето на малка частица върху голяма решетка. Видът химичен елемент също има известно значение, а видът на решетката не оказва съществено влияние.
5. Направена е адаптация на предложения двуетапен метод за работа с наноклетки. С него са изследвани атомното подреждане и процесите на повърхностна сегрегация в златно-сребърни наноклетки от 3000 атома. Сравнителен анализ на резултатите за три състава (Au:Ag = 1:1, 1:3, 3:1) и две решетки (fcc и икосаедрична) показва, че fcc наноклетките имат по-тънки стени, кухня с по-голям радиус и повече нискокоординирани атоми на повърхността в сравнение с икосаедричните. Ag атомите показват тенденция да мигрират към двете повърхности на наноклетката, поради което вътрешните слоеве на Au-обогатените сплави са практически лишени от Ag и преобладават Au-Au връзките. Ag-обогатените сплави имат максимален брой смесени Ag-Au връзки и по-еднороден локален порядък и на двете кристални решетки.
6. Предложена е софтуерна архитектура за реализиране на двуетапния метод, която позволява високо ниво на оптимизиране ефикасността на изчисленията, гъвкаво паралелно пускане със съчетаване на съставните алгоритми при различни условия и добра съвместимост с външни приложения за анализ и визуализация на резултатите.

Може да се приеме, че представените резултати в достатъчна степен покриват обхвата на поставените цел и задачи.

**Авторефератът** на български език в обем 47 стр. и представя дисертационния труд.  
**Авторефератът** на английски език в обем 44 стр. и представя дисертационния труд.

## КРИТИЧНИ БЕЛЕЖКИ

Нямам съществени забележки. Единствено бих предложил, приносите да се формулират малко по-сбито. Също така в текста на дисертацията са забелязани малък брой стилистични грешки, които би следвало да се коригират.

Като цяло структурата и оформлението на дисертацията правят много приятно впечатление. В научно отношение изследването има напълно завършен вид. Приложената методология е ясна и логична. Тя е следвана последователно. Получените резултати са много интересни и полезни.

## ЗАКЛЮЧИТЕЛНА КОМПЛЕКСНА ОЦЕНКА

Направените технически забележки не омаловажават приносите на дисертацията. Считаю, че представеният дисертационен труд отговаря на

изискванията на Закона за развитие на академичния състав в Република България. Постигнатите резултати ми дават основание да предложа на уважаемото научно жури да даде образователната и научна степен „Доктор” на **Росен Михов Михов** в професионално направление – 4.6 Информатика и компютърни науки, докторска програма – „Информатика”.

17.12.2025 г.

гр. София

НА ОСНОВАНИЕ  
ЗЗЛД