

РЕЦЕНЗИЯ

от проф. д-мн Светозар Димитров Маргенов
Институт по информационни и комуникационни технологии – БАН
на дисертационния труд на
доц. д-р Михаил Христов Недялков
на тема

МОДЕЛИРАНЕ НА КИНЕТИКАТА НА ТОКОВИ НОСИТЕЛИ В ПОЛУПРОВОДНИКОВИ ПРИБОРИ

за присъждане на научната степен “Доктор на науките”

1. Актуалност

В наши дни, компютърното моделиране се превръща в основен инструмент за изучаване на явления и процеси в науката и техниката. Все по-общоприето става разбирането за ролята на компютърното моделиране, като трети клон в съвременната наука, заедно с класическите теоретични и експериментални изследвания. Математическите модели на редица важни процеси и явления се описват с помощта на диференциални, интегрални и интегро-диференциални уравнения. Численото решаване на такива уравнения се базира на подходяща дискретизация и ефективни методи и алгоритми за тяхната реализация.

Дисертацията на Михаил Недялков е в областта на изчислителната микроелектроника. Тази актуална област на математическото моделиране изисква компетентност в областта на изчислителната математика, физиката, както и в редица инженерни аспекти на микроелектрониката. Трябва да отбележим, че интердисциплинарен подход от този тип е характерен за съвременните изчислителни науки.

2. Цели и задачи

Предмет на изследванията са модели на физичното поведение на полупроводникови прибори, изразено в термините на пренос на токови носители, който е определящ за електричните им характеристики. За численото решаване на уравненията, описващи математическия модел, се прилагат методи Монте Карло. Изборът на числени методи е добре обоснован от дисертанта. Така например:

- Размерността на дефинираните във фазовото пространство уравнения е между 3 и 7, като с нейното увеличаване все по-силно изразени стават преимуществата на Монте Карло методите.
- Процесите на динамика на електроните, се описват с помощта на функции, които имат директна вероятностна интерпретация. По тази причина, първоначално Монте Карло методите за моделиране на полупроводникови прибори имат характер на директна симулация на физичните процеси.

Представените в дисертацията изследвания са насочени към взаимно свързаното развитие на кинематични модели на електронен транспорт и съответните Монте Карло Методи и алгоритми за тяхната реализация. Поставените цели включват следните задачи: а) Развитие на универсален подход на базата на теорията на методите Монте Карло за решаване на уравнения, описващи разглежданите процеси; б) Прилагане на итерационен подход за извеждане на нови алгоритми с подобрени свойства, като в същото време, в рамките на Монте Карло анализа се търси подобрена физическа интерпретация на моделите и процесите; в) Извеждане на квантови модели и тяхната интерпретация в термините на частици; г) Прилагане на изведените класически и квантови алгоритми за числено решаване на конкретни задачи, даващи нови възможности за анализ на важни физични процеси, закони и явления.

3. Структура и съдържание

Дисертацията е в обем от 279 страници и се състои от увод, четири глави и библиография. Резултатите са онагледени с 45 фигури. Библиографията включва 129 заглавия, от които една на руски, две на немски и 126 на английски език. Цитираните заглавия обхващат работи в периода от 1925 г. до 2010 г.

Увод

Уводът е в обем от осем страници и включва мотивировка и актуалност на темата, цели и задачи, както и организация на изложението в дисертацията.

Глава 1

Тази глава е озаглавена “Моделиране на полупроводникови прибори”. Тя има въвеждащ характер. Тя се състои от осем раздела на 45 страници. В сбита форма са представени основни понятия, величини, модели и уравнения от статистическата механика, физиката на твърдото тяло и на квантовата механика във фазовото пространство. Раздел 1.3 е посветен на анализ на основни модели на полупроводникови прибори. Във Фиг. 1.3 и Фиг. 1.4 са представени съответно, основните транспортни модели и йерархията на модели, използващи Вигнерово представяне на квантовата механика. В раздели 1.5 и 1.6 са разгледани уравнението на Болцман за класически транспорт и съответно квантов транспорт, описван с уравнението на Вигнер. В раздел 1.7 в са представени основни идеи на методи Монте Карло за числено пресмятане на интегрални и числено решаване на интегралното уравнение на Фредхолм от втори ред. Показана е рекурсивна процедура, при която решението се развива в Нойманов ред. Този подход е в основата на численото решаване на уравненията на преноса, конструирани и изследвани в настоящата дисертация.

Научните и научно-приложните приноси на дисертацията са представени във втора и трета глава.

Глава 2

Глава 2 е посветена на моделиране на класически електронен транспорт. В рамките на 94 страници са включени четири раздела с подраздели. В началото е направен преглед на класически алгоритми за директна симулация, следвайки историческата хронология за задачи в хомогенни полупроводници. За тези частни резултати е приложен общ подход на методите Монте Карло. Получено е систематизирано представяне на различни (до този момент) техники и е анализирана скоростта на сходимост. В раздел 2.2 са изследвани алгоритми за анализ на отклика на системата носители в полупроводник, при слаби промени в приложеното поле. Тук можем да отбележим изведеното уравнение (2.23) за физически процес на еволюция след пертурбация и разработения Монте Карло метод за неговото решаване (виж Теорема 2.2.1). Специално е разгледан случая на колинеарни пертурбации. Показано е, че в този случай може да се използва стационарното уравнение на Болцман, като са предложени и анализирани два Монте Карло алгоритъма (Алгоритъм 2.2.3 и Алгоритъм 2.2.4). Представени са симулационни резултати, получени с Алгоритъм 2.2.4. Показана е интерпретация на резултатите, даваща възможност за анализ на физичните явления, както и за получаване на стойности на съответните физични параметри. Раздел 2.3 е посветен на нехомогенни едночастични алгоритми. Задачата се свежда до намиране на функционал от решението на стационарното нехомогенно уравнение на Болцман (2.41). В подраздел 2.3.3 са дискутирани интересни особености на стохастичния подход свързани със свободата на избор на границата и съответните варианти за реализация на алгоритъма (виж Фиг. 2.12). В Теорема 2.3.5 е показано, че стойността на f_{Ω} не зависи от вариантите **A**, **B** или **C** за избор на границата от която започват траекториите. В раздел 4.2 е разгледано уравнението на Болцман с начално и гранично условие, което представлява най-общата формулировка на задачата за класически транспорт на носители в полупроводникови структури. Изведено е съответното спрегнато уравнение (2.89), виж Теорема 2.4.1. Анализиран е приноса на началното и граничните условия. В Теорема 2.4.3 са получени представяния за дисперсията в зависимост от типа и нормировката на началното условие. В раздел 2.4.5 е разгледано модифициране на естествените вероятности. Важно е да отбележим, че получените в предходните раздели резултати (и подходи) не могат директно да бъдат приложени и в този случай. Представените на Фиг. 2.17 и Фиг. 2.18 числени резултати показват по бърза сходимост и по-добра стабилност за алгоритъма с модифицирани естествени вероятности. Това обаче не е така в случая показан на Фиг. 2.19. Едно възможно обяснение за това е, че получената неустойчивост се дължи на наличието, както на леки така и на тежки частици в контактните области. Направен е извода, че модифицираните алгоритми трябва да се прилагат съгласувано със съответните физичните средни, които трябва да са свързани с областите на подобрена статистика.

Глава 3

В тази глава е представено развитието на теоретични и числени подходи, свързани с приложението на формализма на Вигнер за моделиране на квантов транспорт. Дефинирана във фазовото пространство, Вигнеровата квантова механика дава възможност за естествено обобщение на редица понятия от класическата механика. Така например, функцията на Вигнер се интерпретира, като квантов аналог на класическата функция на разпределение. Тази интерпретация е нетривиална. Нека отбележим в частност, че функцията на Вигнер допуска и отрицателни стойности.

Глава 3 се състои от 84 страници, структурирани в 3 раздела с подраздели. Изложението следва систематичен подход на базата на йерархия на кинетичните модели представени във Фиг. 3.1. Раздел 3.1 разглежда еволюция на квантова жица. Физическата система се състои от група токови носители, чиято еволюция протича в квантова жица с разпределено електрично поле при условия за вибрация на решетката. Ще отбележа, изведеното в Теорема 3.1.1 обобщение на уравнението на Левинсон за хомогенен полупроводник, което е наречено нехомогенно уравнение на Левинсон. В раздел 3.1.7 са представени числени резултати, които демонстрират квантовия характер на изследваните кинетични уравнения. Специален интерес предизвикват резултатите показани на Фиг. 3.9 и Фиг. 3.10, които се интерпретират в термините на нов ефект, наречен “ултрабърз транспорт в пространството”. Този ефект се обяснява с липсата на закон за запазване на енергията в ранния стадий на еволюция на системата. Раздел 3.2 е посветен на извеждане на йерархията на кинетичните модели от Фиг. 3.1. Изведено е уравнение на Вигнер-Болцман (3.58) при граница (3.56), записана в термините на обобщени функции. Важно е да отбележим, че законите за запазване на енергията и импулса са включени в (3.58). Последният раздел на тази глава е посветен на конструиране и изследване на методи Монте Карло за решаване на уравнението на Вигнер-Болцман. Разгледаните варианти на Монте Карло алгоритми са резултат от системен анализ на различните типове взаимодействия и тяхната интерпретация в термините на итерационните Монте Карло методи. Разгледани са два алгоритъма с вериги на Марков. Така например, в случая на кохерентен транспорт (съответната верига на Марков е неразклонена) е доказана експоненциална оценка за ръста на средното акумулирано тегло W . Вариант с разклонени вериги на Марков е разгледан в раздел 3.3.5.4, в основата на който е идеята за разделяне на частиците при всяко взаимодействие с потенциала на Вигнер. Това от своя страна изисква принципно различна интерпретация на квантовото взаимодействие. Разгледани са числени аспекти на модела на генерация и са представени числени резултати от симулация на резонансно-тунелни диоди, като пример на прибори със смесен транспорт, чието поведение се определя както от разсейването, така и от тунелирането.

Глава 4

В тази глава е даден списък на основните научни и научно-приложни приноси, списък на публикациите по дисертационния труд, информация за цитирания, благодарности, декларация за оригиналност на резултатите и научна автобиография.

Раздел 4.1

Приемам авторската справка за основните научни и научно-приложни приноси. Те могат да бъдат формулирани, както следва:

- Разработен е нов модел за анализ на слаб сигнал, който изразява реакцията на физическата система, като Болцманова еволюция. На базата на общ подход са изведени четири Монте Карло алгоритъма, два от които обобщават съществуващи такива. Научно-приложните приноси са свързани с получаване релаксацията на физични параметри, изследване на ефекти, както и на влиянието на принципа на Паули върху електронната кинетика.
- Преформулирано е нехомогенното стационарно уравнение за Болцманов транспорт, като е изведено спрегнатото уравнение и съответните гранични условия. Изведени са основните феноменологични едночастични алгоритми, като с помощта на Монте Карло анализ е доказана тяхната ергодичност.

Доказано е, че решението на стационарната задача е инвариантно по отношение на избора на алтернативна граница.

- При най-общи предположения е изведен вероятностен модел за нестационарната задача за класически транспорт, като са определени съответните начални и гранични условия. Получени са оценки за дисперсията. Разработени са техники за подобряване на статистиката посредством модифициране на естествените вероятности, свързани с началните и гранични условия, процесите на свободен полет и разсейване, както и еволюцията на съответните тегла. Предложено е ефективно решение на проблема за самосъгласуване на тези алгоритми с уравнението на Поасон.
- Получена е йерархия от квантово-кинетични модели, които описват в различна степен на приближение включването на вибрациите на решетката във Вигнеровата формулировка на квантовата механика на системата електрон-потенциал. При най-общи предположения е изведен модел, наречен уравнение на Вигнер-Болцман. При специален избор на физическата система то се свежда до уравнението на Левинсон за хомогенен полупроводник или до неговото обобщение за случая на квантова жица. За този случай е изведено и уравнение на Баркер-Фери. Научно-приложните резултати включват анализ на решения за квантови ефекти, като “ултрабърз транспорт в пространството” и нарушаване на закона за запазване на енергията.
- Граничната задача за уравнение на Вигнер-Болцман е преформулирана в термините на изведеното спрегнато уравнение. Получени са и са анализирани два алгоритъма за квантови частици. При първия е показано, че теглата растат експоненциално. За втория, базиран на генерация и аниhilация на частици, е получена интерпретация за взаимодействието електрон-потенциал.

Раздел 4.2

Представеният списък на публикации по дисертационния труд включва 29 статии, като 18 от тях са в най-авторитетни специализирани международни научни списания с импакт фактор, в това число: Applied Physics Letters (IF 3.7), Physical Review B (IF 3.4), Journal of Applied Physics (IF 2.2), IEEE Transactions of Electronic Devices (IF 1.9), Microelectronic Engineering (IF 1.4), Semiconductor Science Technology (IF 1.2), Mathematical and Computer Modelling (IF 1.1), Physical Status Solidi (IF 1.1), Mathematics and Computers in Simulation (IF 1.0), SIAM Journal of Applied Mathematics (IF 0.6). Част от останалите статии са в специализирани томове на Springer LNCS, които през съответните години са имали импакт фактор, което не е отбелязано от дисертанта.

Раздел 4.3

В съответствие с представената от дисертанта справка, публикациите по дисертацията са цитирани 90 пъти. Представен е подробен списък на цитиранията на 3 избрани статии, които са цитирани съответно: [1] – 5 пъти; [5] – 5 пъти; [26] – 41 пъти. Голяма част от цитиранията са в най-авторитетни списания и научни издания.

Представените в дисертацията научни и научно-приложни резултати, публикациите по дисертацията, както и справката за тяхното цитиране напълно удовлетворяват изискванията на ЗРАС, ППЗРАС, както и специфичните изисквания в правилниците на БАН и на ИИКТ-БАН за присъждане на научната степен “Доктор на науките”.

4. Критични бележки и препоръки

Нямам критични бележки по същество, свързани с представените научни и научно-приложни резултати.

Основните научни резултати са оформени, като твърдения и теореми. В някои от тях можем да имаме претенции към математическата строгост на доказателствата. Така например, равенство (3.85) в Теорема 3.3.2 има смисъл единствено, като граница на теглото \mathbf{W} . Строгото доказателство следва от известната граница $x^x > e$ при $x > ?$.

Доста повече могат да бъдат езиковите критични бележки. Част от тях очевидно са свързани с недостатъчно внимателен превод на български, на съответни текстове от публикации на английски език. Ще се ограничи само с два примера. Предполагам, че “натурално число” означава “естествено число”. Съща така, “Уравнението за f се извежда с помощта на *счетоводство* на баланса на процесите, ...” може би звучи по-добре на български във вида “Уравнението за f се извежда с отчитане на баланса на процесите, ...”.

Научната автобиография не е преведена на български.

Считам, че горните забележки са важни, като в същото време те не променят положителната ми оценка за стойността на представените в дисертацията резултати.

Бих си позволил също така да препоръчам в бъдеще по-активно ангажиране на доц. Михаил Недялков в ръководство на дипломанти и докторанти.

5. Лични впечатления

Познавам Михаил Недялков, като високо квалифициран, сериозен, коректен и добре организиран учен с доказани възможности за задълбочени научни изследвания и комплексна интерпретация на получените резултати. Многократно съм присъствал на международни научни форуми, където докладите на дисертанта са предизвиквали сериозен интерес и положителни отзиви в професионалната научна колегия.

6. Заключение

Представените в дисертационния труд научни и научно-приложни резултати, част от които са новост за науката, а други съществено обогатяват известни вече знания, както и личните ми впечатления, ми дават основание убедено да препоръчам на научното жури да присъди на доц. д-р Михаил Христов Недялков научната степен “Доктор на науките” по специалност 01.01.13 “Математическо моделиране и приложение на математиката”.

27.09.2011 г.

София

Рецензент:


/проф. дмн Светозар Маргенов/