

РЕЦЕНЗИЯ

върху дисертационен труд за присъждане на научната степен “доктор на науките” по научната специалност 01.01.13 “Математическо моделиране и приложение на математиката”

Автор на дисертационния труд: Михаил Христов Недялков, ст.н.с., д-р  
ИИКТ-БАН

Тема на дисертационния труд: “Моделиране на кинетиката на токови носители в полупроводникови прибори”,

Рецензент: Ана Йовкова Пройкова, проф., д.фн, д-р  
Софийски университет, Физически факултет

1. *Актуалност на проблема*

Нано- и микро-устройствата са технологичната сърцевина на съвременната компютърна и комуникационна революция. С откриването на транзистора в късните 40-години на миналия век и разработването на първите интегрални схеми през 60-те, започва процесът на миниатюризация на елементите, чиито размери намаляха експоненциално с времето. През тази година (2011) започна да навлиза технология, която ще направи възможно да се произведат устройства, в които половината разстояние между еквивалентни елементи е 22-nm. Проблемите, които такава миниатюризация поставят, са изключително сериозни и произтичат от фундаменталните, квантови свойства на материята. Един метод за преодоляване на част от проблемите, публикуван в Международната технологична пътна карта за полупроводниците (The International Technology Roadmap for Semiconductors), е да се конструират силициевите устройства така, че да се състоят от ултратънки, зарядово обединени силициеви области, оградени от гейтове. Особеността на тази технология е, че силициевите области не са планарни, а изпъкнали, което поставя освен технологични и чисто фундаментални проблеми, свързани с границата, през която се очаква да преминат зарядите.

В обстановката на бързо развитие на технологиите, които се сблъскват с квантовите бариери, е наистина нужно да се развиват модели за квантов и смесен транспорт и да се разработват методи за тяхното решаване, които да могат да се алгоритмизират. Дисертационният труд на г-н Недялков е именно в тази “гореща област” на науката.

Обект на изследване в дисертацията е електронният транспорт в полупроводникови структури, като акцентът е върху синергията между развитието на кинетичните модели на транспорт и методите Монте Карло. Това е много интересна гледна точка, която е реализирана математически чрез прилагане на няколко Монте Карло техники за решаване на уравненията, които управляват процесите на пренос. Едно от важните достижения на автора е "итерационният подход", който се оказва плодотворен при извода на нови алгоритми (класически и квантови) с подобрени свойства. Тези алгоритми са използвани за симулиране на реална задача – жица от галиев арсенид с квадратно сечение, със страна на квадрата 10 нанометра, чиито конкретни параметри са взети от експериментална работа на независими изследователи. Симулационният експеримент е обяснен подробно и резултатите от него демонстрират квантовия характер на кинетичните уравнения. Използвана е техниката на Монте Карло метод с обратна еволюция, чиято ефективност е внимателно дискутирана в главата "Моделиране на класически транспорт". Алгоритъм за обратната еволюция е предложен от Kosina, Nedjalkov and Selberherr в работата "A Stable Backward Monte Carlo Method for the Solution of the Boltzmann Equation" in Lecture Notes in Computer Science, 2004.

Резултатът от симулационния експеримент е само един от много важните резултати, някои от които са изброени в точка 4 от настоящата рецензия.

Решените задачи и научните приноси имат главно теоретичен и числен аспект, като трябва да се отбележи и приложният характер на някои от тях, както съм отбелязала в точка 2 от настоящата рецензия.

Дисертацията е написана на 279 стр., разпределени в четири глави. Последната глава съдържа основните приноси в научното изследване, публикациите по дисертационния труд и част от цитаринията им в научната литература, списък на цитиранныте публикации и научната биография на г-н Недялков, която показва устойчивото му развитие на учен.

Дисертационният труд е самостоятелна творба, която високо оценявам. Начинът, по който е организирана дисертацията, дава възможност на читателя да проследи всички етапи в придобиването на познание. Добрият научен език и ясната мисъл са главните характеристики на тази дисертация, която ще бъде полезна и за бъдещите изследователи.

## *2. Съвременните достижения в областта на изследванията и тяхното по-нататъшно развитие в дисертационния труд*

Съвременните достижения са представени във всяка една от главите на дисертацията, като научните резултати, постигнати от автора и неговите сътрудници е правилно поставен в рамките на достиженията на останалите.

В главата “Моделиране на полупроводникови прибори” са подробно представени подходите, които се използват като във фокус са квантовите явления при пренос в кристална решетка – идеална и с дефекти. Тази глава в поглямата си част е уводна и е много необходима за правилния прочит на останалите глави.

“Моделиране на класически транспорт” е втората глава, в която много добре са представени класическите алгоритми за електронен транспорт, използвани в методите Монте Карло. Достиженията на автора са правилно формулирани и поставени в съответните раздели. Тук искам да отбележа работите на автора върху граничните условия при контактите. Резултатите от тези изследвания могат да намерят директно приложение в електрониката. Друг интересен авторски резултат в контекста на съвременните достижения е демонстрацията, че феноменологичната техника на Soch и Krumhansl се интерпретира от гледна точка на Монте Карло метода за решаване на интеграли. Още една стъпка в развитието е обобщението на техниката за обратната еволюция и интеграла по траектории, работите [52,53,54] от списъка на публикациите.

Третата глава е посветена на “Моделиране на квантовия транспорт” във формализма на Вигнер, в който се работи във фазовото пространство. Тук е направен преглед върху изследвания за повече от двадесет години, като са посочени етапите на усъвършенствания. Анализирана е ролята на дисипативните процеси при изучаване на полупроводниковите приори. Зададен е важният въпрос дали “може класическият модел на Болцманово разсейване да бъде включен в квантовата картина на Вигнеровия транспорт” и правилно е казано, че отговор може да се намери само при правилно мащабиране на физичните величини и явления. При мащабирането (scaling) възниква проблем, свързан с паметта на една система, което не позволява да се работи с Марковски вериги и процеси. Ролята на моделирането е много важна

при решаване на тези задачи.

Тук бих искала да поставя въпрос за интерпретацията на Collisional Broadening, като “результат от нарушаване на закона за запазване на енергията”. Не е ли възможно, то да се дължи на отваряне на системата? Знаем че, законът за запазване на енергията е коректно дефиниран само за изолирани системи. Когато се обсъжда произведението време-енергия, имплицитно (неявно) попадаме в условия на излъчване (поглъщане), т.е. системата се отваря. Известен факт в атомната физика е, че неопределеностите в адсорбционната и емисионната дължини на един и същи преход са различни, точно поради различните мащаби на времевите процеси.

Конструкцията на третата глава е много интересна и дава последователното развитие на текущите достижения от авторските работи. Разглежданата система е квантова жица, по която токови носители еволюират при наличие на разпределено електрично поле и взаимодействия с вибрациите на решетката, които се разглеждат като обемни фонони, тъй като жицата е разположена в полупроводников кристал. Носителите са с малка плътност и не се отчитат взаимодействия между тях. Искам да отбележа, че такава постановка на задачата съответства на съвременните технологии, за които писах накратко в началото на тази рецензия.

### *3. Методи на изследване и тяхното развитие в дисертационния труд*

Методите на изследване са теоретични, а в приложната част – симулационни.

Направени са значителни развития в методите Монте Карло, като теорията на методите е обогатена.

В областта на квантовия транспорт е получено нехомогенно уравнение на Bakker\_Ferry за квантова жица. В дисертацията подробно са описани стъпките на получаване на това квантово-кинетично уравнение и могат да се проследят всички приближения, при които е постигнат резултатът. Нивото на достоверност (пренебрегнати членове) е до ефект наречен “поляронна ренормализация на енергиите”.

#### *4. Приноси в дисертационния труд, неспоменати в предходните параграфи*

Изследванията имат значителни приноси, част от които вече изложих в предишните части на рецензията. Други значителни приноси, неспоменати досега са следните:

- преформулирана е нехомогенната стационарна задача за Болцмановия транспорт и са изведени основни феноменологични алгоритми на едночастичната техника. Резултатите са формулирани и в пет теореми и две твърдения;
- представен е вероятностен модел за най-общата времезависима задача за класически транспорт. Оценена е дисперсията при различни постановки на задачата и, което е особено важно за тази област от изчислителните науки, разработени са техники за подобряване на статистиката. В тази част са формулирани четири теореми и четири твърдения;
- получени са и анализирани два алгоритъма за квантови частици. В единия, основан на раждане и унищожаване на частици, е получена интерпретация на взаимодействието “електрон-потенциал”. Този алгоритъм е приложен за симулация наnanoструктури.

#### *5. Наукометрични показатели – публикации, върху които се основава дисертационния труд и тяхното отражение в научната литература*

Включени са 29 публикации, от които 18 са в списания с импакт-фактор, две глави от книги и 9 в специализирани издания. Авторът е отбелаязъл, че почти всички работи са в съавторство, но според мен това не намалява стойността на научните достижения. Ясно е, че в интердисциплинни области самостоятелните работи са голяма рядкост и са обобщения или глави от книги. Такава публикация има в списъка на авторските публикации.

Цитиранията на включените работи са около 100, а h-индекса на г-н Недялков според Google-calculator е 13. Последният индекс споменавам по-скоро като закачка към любителите на наукометричното индексиране в нашите области.

#### *6. Автореферат – отражение на основните научни приноси*

Авторефератът е много добре написан, така че дава възможност да се

направи оценка на многобройните резултати, получени в дисертацията, както и на тяхното място в научната литература.

#### *7. Заключение*

Извършените изследвания и получените в дисертацията резултати отговарят по обем и по съдържание на изискванията за научната степен “доктор на науките” и убедено препоръчвам на научния съвет към Института по информационни и комуникационни технологии към Българската Академия на Науките да присъди на д-р Михаил Христов Недялков научната степен “доктор на науките” по научната специалност 01.01.13 “Математическо моделиране и приложение на математиката”.

28.09.2011 г.

София

проф. Ани Пройкова, дн

