

РЕЦЕНЗИЯ

за дисертационен труд
за придобиване на научната степен „доктор на науките”

в област на висше образование
4. Природни науки, математика и информатика,
Професионално направление: 4.5 Математика

Научна специалност: 01.01.13 – Математическо моделиране и приложение на математиката

Автор на дисертацията: доц. д-р Михаил Христов Недялков

Тема на дисертацията: Моделиране на кинетиката на токови носители в полупроводникови прибори

Рецензент: проф. дн Даниел Маринов Данчев

1. Предмет на рецензиране

Представените материали съдържат:

- ▲ Дисертационен труд;
- ▲ Автореферат на дисертацията.

2. Обща информация за дисертацията и публикациите, на които тя е базирана

Дисертацията е с обем 279 страници и съдържа 4 глави, последната от които обхваща формално-справочни свързани с автора на дисертацията материали. Използвани са 129 цитирани от автора научни източника. Дисертацията се базира на 29 авторски публикации от които 18 в списания с импакт фактор (ИФ) с общ ИФ 30.7, 2 публикации са глави от книги, 9 публикации в материали на конференции и други. Статията с най-висок ИФ е публикувана в Appl. Phys. Lett. от 2002 г. – ИФ 3.7. Общият H-индекс (Hirsch index) на всички работи на автора е 11, като общият брой забелязани цитирания по статиите от дисертацията е „над 90“ съгласно съответния текст от автореферата. Официалният списък с цитирания, включен в самата дисертация, съдържа 51 цитирания и е концентриран само върху 3 работи на автора. Очевидно целта на този списък е да демонстрира, че са удовлетворени минималните изисквания на Института по информационни и комуникационни технологии. Съгласно тези изисквания дисертацията на кандидат за придобиване на научната степен „доктор на науките” трябва да е базирана на поне 25 научни публикации, от които поне 15 да са в списания с импакт фактор или в

специализирани международни издания и да са цитирани поне 50 пъти за дисертации с чисто научен характер. От казаното по-горе е ясно, че кандидатът удовлетворява тези формални изисквания. По мое искане на мен ми бе предоставен списък с цитирания на работите на автора използвани в дисертацията, който съдържа 98 цитирания, но в автоматично изготвената от Quadsearch справка има и автоцитирания. Вземайки предвид, че една от работите на кандидата има 41 цитирания, е напълно ясно, че голямата част от тези „над 90“ цитирания е концентрирана върху някои особено важни работи на автора. Авторът е водещ в 21 от публикациите си използвани в дисертацията, като 13 от тях са в списания с ИФ с общ ИФ 22.6. Нормирани на автор ИФ на публикациите му става 8.46, а на тези, в които авторът е водещ – 6.1, т.е. спада над 3.5 пъти, което показва, че авторът обича да работи в големи колективи от съавтори. Доколкото авторът е и водещ в над 70% от тези публикации, последното още ясно демонстрира и неговото умение да мотивира многобройни колективи от съавтори, които вярват в предложената от него идея и работейки по нея да достигат до значими резултати публикуеми в реномирани списания. Аз ценя това качество на един учен, особено на такъв който очевидно предстои да израсте в научната си кариера.

3. Актуалност на проблема

Най-общо казано математическото моделиране на процеси в природни и технологични системи понастоящем е, и в обозримо бъдеще със сигурност ще остане, една от най-актуалните задачи на науката. От няколко десетилетия компютрите се използват все по-масово и все по-съществено са част от процеса на моделиране водещ към получаването на все по-реалистични резултати базирани на все по-усъвършенствани модели отразяващи все по-добре както отделни свойства на изследваните системи, така и на процесите в тях. Настоящата дисертация е посветена на моделиране на кинетиката на токови носители в полупроводникови прибори. От около 15 години в тази област се изработва и периодично осъвременява международна технологична пътна карта за полупроводникови прибори (International Technology Roadmap for Semiconductors - ITRS), в която са обединени усилията на изследователи и представители на индустрията от Европа, САЩ, Корея, Япония и Тайван, т.е. на практика на всички които има какво да кажат по тези въпроси. Последното и издание е от 2010 г. ITRS показва както съвременното състояние на нещата в тази очевидно от особено значение за съвременния свят област, така и маркира очакваното развитие, етапи и цели за постигане в по-близък или по-далечен план. Въпросите свързани с математическото моделиране са разгледани на стр. 49-53. Отбелязано е, че те покриват днес на практика всичко, което се прави или е свързано с тази област. В стратегията конкретно са посочени предизвикателствата пред областта свързани както с развитието на технологиите, в които характерните размери са над 16 nm (понастоящем типичните размери на активните области на днешните процесори са например транзистори с 45 nm дължина на канала), така и тези за следващото поколение технологии от порядъка на и под 16 nm. Това е едно конкретно и изключително обогатяващо четиво за всички занимаващи се с моделиране, но аз бих искал само конкретно да спомена важните за кандидата и споменати там теми като методи, модели и алгоритми, с помощта на които помагат да се предвидят технологичните граници, както и изчислително-ефективни симулатори на квантов транспорт (виж стр. 52 от ITRS);

моделиране на наноустройства и отражението в тяхната работа на явления като тунелиране и квантуване и др. Според мен казаното по-горе прави очевидно както несъмнената актуалност и значимост на научната тематика на кандидата, така и нейната перспективност.

4. Обзор на съдържанието и резултатите в дисертационния труд.

Както вече бе казано по-горе, дисертацията съдържа 4 глави, последната от които представлява съвкупност от формално-справочни свързани с автора на дисертацията материали. Глава първа, озаглавена “Моделиране на полупроводникови прибори“, е обзорна, докато глава втора “Моделиране на класически транспорт“ и глава трета “Моделиране на квантов транспорт“ съдържат приносните резултати на кандидата. Целта на дисертацията е развитието на базата на Монте Карло методи на универсален подход за изследване на кинетични модели на електронен транспорт в полупроводникови структури и прибори и прилагането на този подход, наречен итерационен, за генериране на нови класически и квантови алгоритми с подобрени свойства които след това се прилагат за изследване на конкретни системи.

В уводната Глава 1 се дискутират ролята и задачите на моделирането на полупроводниковите прибори, въвеждат се полупроводниковият модел, основни понятия като фазово пространство и траектории, представят се уравненията на Болцман и Вигнер. Изложени са и основите на Монте Карло подходите за оценка на интеграли, решаване на интегрални уравнения и преформулиране на задачата с помощта на спрегнато уравнение. Дадена е една добра сбита представа за йерархията на съществуващите модели описващи както потока на токови носители – в термини на концентрация, средна скорост и енергия на зарядите), така и полетата (примерно електрични и магнитни полета), управляващи този поток. При това полетата възникват както от външни фактори, така и от концентрацията и потока на зарядите, т.е. описва се една само-съгласувана система от величини.

Глава 2 започва с разглеждане в частта си 2.1 “ Монте Карло техники “ развитието на Монте Карло алгоритмите за класически транспорт. Следва се историческия план, започващ с едно-частичната и ансамбловата техники. Представено е в детайли тяхното обобщаване в рамките на предложението от автора итерационен подход и приложението му за анализ на слаб сигнал и за извод на общ само-съгласуван Монте Карло алгоритъм с тегла за смесената задача с начални и гранични условия. Приносите на автора за извода, развитието и приложенията на итерационния подход са формулирани в 5 твърдения и 10 теореми, а разработените алгоритми са 8. В тази глава са представени приносите на автора формулирани като авторски претенции в точки 4.1.1 до 4.1.3.

Глава 2.2 е посветена на алгоритми за анализ на слаб сигнал. От физическа гледна точка задачата се формулира като намиране на връзката между една слаба хармонична пертурбация на едно управляващо токовете носители външно поле, например електрическото поле, и индуцираните от това промени на средната стойност на дадена физична величина осцилиращи със същата честота. Анализът по честоти може да се преформулира с помощта на Фурие трансформация в термините на време. В глава 2.2 е доказана теорема за решението на уравнението на Болцман при импулсна по времето пертурбация на електричното поле и е предложен, на нейна база, модел за анализ на слаб сигнал, който се базира на определяне реакцията на физичната система описвана чрез Болцмановата и еволюция осъществяваща се под въздействието на постоянно електрично поле от две различни начални условия характеризирани с еднакъв брой частици. На базата

на модела са изведени четири общи алгоритъма, два от които обобщават съществуващите такива, както и два специализирани алгоритъма за условия, близки до равновесните при голяма концентрация на електроните.

В глава 2.3 нехомогенната стационарна задача за Болцманов транспорт е преформулирана с помощта на спрегнато уравнение и са изведени съответстващите гранични условия. Изведени са основните феноменологични алгоритми на едночастичната техника. С помощта на Монте Карло анализ е показана ергодичност на физичната система. Демонстрирано е, че решението на стационарната задача е инвариантно по отношение на избор на алтернативна граница.

Резултатите са формулирани в пет теореми, две твърдения и два алгоритъма.

В глава 2.4 е изведен вероятностен модел за най-общата време-зависима задача за класически транспорт, определена от начални и гранични условия. Получени са оценки за дисперсията за различни постановки на задачата. Разработени са техники за подобряване на статистиката с модифициране на естествените вероятности, свързани с начални и гранични условия, процесите на свободен полет и разсейване, както и еволюцията на съответните тегла. Решен е проблемът за само-съгласуването на тези алгоритми с уравнението на Поасон. В частност схемата може да е такава, че да избегне инициализация на всяка стъпка за само-съгласуване на решенията. Изследвани са приложения в актуални симулационни задачи като над-барьерна инжекция и протичане на подпрагов ток (на актуален прибор, произведен от Intel), при които явления с малка вероятност контролират функционирането на прибора.

Резултатите в Глава 2.4 са формулирани с помощта на четири теореми и четири твърдения.

Глава 3 е посветена на моделирането на квантов транспорт и отразява приносите на автора за извод на йерархия от модели, разработване на съответни алгоритми на базата на итерационния подход, тяхното прилагане и анализ. Изведени са уравнения за еволюцията на фото-генерирани електрони в нано-жица, при които електрон-фононното взаимодействие има квантов характер. Решенията им са пресметнати с итерационния метод на обратната еволюция и демонстрират ясно изразени квантови ефекти.

За изводите на представените резултати съществено се използват теореми и твърдения от глава 2, на базата на които са формулирани 4 нови теореми и 2 алгоритъма. В глава 3 са представени приносите на автора формулирани като авторски претенции с номера 4.1.4 и 4.1.5.

В глава 3.1 "Еволюция в квантова жица" разглежданата физическата система се състои от група токови носители, чиято еволюция протича в квантова жица, по която е разпределено електрично поле, и при условия на взаимодействие с вибрациите на решетката. Предполага се, че жицата е с добро приближение полупроводников кристал, и поради това вибрациите и се описват от обемни фонони. Изведено е обобщено уравнение на Вигнер, което всъщност води до безкрайна система от взаимно-свързани уравнения за електронните променливи. Загледани са различни подходи за затварянето на тази система уравнения. Конкретните числени резултати са свързани с анализ на гореспоменатите уравнения за квантови ефекти като Ultrafast Spatial Transfer, както и на ефект, който автора нарича "нарушаване на закона за запазване на енергията", получени с Монте Карло техника на обратната еволюция. Твърдението за нарушаване на закона за запазване на енергията за мен е неприемливо и неговата подходяща, според мен, интерпретация е дискутирана в параграф №5 на настоящата рецензия.

В глава 3.2 е изведена йерархия от квантово-кинетични модели, които описват в различна степен на приближение включването на вибрациите на решетката във Вигнеровата формулировка на квантовата механика за системата електрон-потенциал. Получени са система уравнения за електронната функция на Вигнер, която е показано, че може да бъде сведена до основно уравнение. При специален избор на физичната система основното уравнение се свежда до уравнението на Levinson за хомогенен полупроводник или до неговото обобщение за случая на квантова жица. За този случай е изведено и нехомогенното уравнение на Barker-Ferry.

В глава 3.4 се разглежда стационарната задача за уравнението на Вигнер-Болцман с гранични условия преформулирани с помощта на изведено спрегнато уравнение. Получени и анализирани са два алгоритъма за квантови частици. Един от алгоритмите е приложен за симулация на наноструктури и сравнен с резултатите от други подходи.

Като цяло констатирам значителен потенциал за продължаване на изследванията, описани в глава 3 на дисертацията. В Web of Science се натъкнах на две публикации на автора по, според мен, темата на дисертацията, които обаче, необяснимо за мен, не са включени в представения списък от публикации. Едната работа е от 2008 г. "Modeling thermal effects in nanodevices" публикувана в IEEE Transactions on Electron Devices, а другата е от 2010 г., публикувана е в Mathematics and Computers in Simulation, и е озаглавена "Electron-phonon interaction in nanowires: A Monte Carlo study". В тази връзка е и един от въпросите ми в параграф № 7 на настоящата рецензия.

5. По приносите на дисертационния труд

В авторската справка за приносите в дисертационния труд на стр. 249 - 250 от дисертацията са посочени 5 групи приноси. Всеки един от приносите е реализиран в дисертационния труд, поради което признавам тези приноси. Без да подценявам значителната по обем работа свързана с реализацията на изчислителните схеми, считам за най-значителни приносите свързани с разглеждането на Вигнер-Болцманов транспорт. Най-важната част от тях са публикувани в

M. Nedjalkov, H. Kosina, S. Selberherr, C. Ringhofer, and D. Ferry, "Unified particle approach to Wigner-Boltzmann transport in small semiconductor devices," *Physical Review B*, vol. 70, pp. 115319–115335, Sept. 2004. impact factor 3.4

Тази работа е цитирана 41 пъти. Бих искал също да отбележа работа

M. Nedjalkov, "Wigner transport in presence of phonons: Particle models of the electron kinetics," in *From Nanostructures to Nanosensing Applications, Proceedings of the International School of Physics 'Enrico Fermi'* (A. Paoletti, A. D'Amico, G. Ballestrino, ed.), vol. 160, (Amsterdam), pp. 55–103, IOS press, 2005; book chapter.

която съдържа в разгърнат вид изводът на йерархията кинетични уравнения за електрон-фононната кинетика. Този резултат е в основата на систематичен извод на уравненията на Levinson и Barker-Ferry обобщени за транспорт в квантова жица в публикация N5 и наблюдаването на ефекта Ultrafast Spatial Transfer в симулационните резултати.

Тази работа е цитирана 5 пъти.

В дисертацията е декларирано, че целта и е развитието на базата на Монте Карло методи на *универсален* подход за изследване на кинетични модели на електронен транспорт в полупроводникови структури и прибори и прилагането на този подход, наречен итерационен, за генериране на нови класически и квантови алгоритми с подобрени свойства които след това се прилагат за изследване на конкретни системи. Очевидно е направено много за обобщаване и доразвитие както на съществуващи класически, така и на съответни квантови методи за такива изследвания. Добре е известно обаче, че доброто разбиране на статуса на определена област предполага яснота върху направените предположения, а за квантовия случай – и на подходящата им интерпретация.

Възникват естествените въпроси

- ▲ Какви са ограниченията на предложения универсален подход за изследване на кинетични модели на електронен транспорт в полупроводникови структури и прибори? В какъв смисъл този подход е *универсален*?
- ▲ В тази връзка – има ли предположения и ако има кои са те, които могат да бъдат отслабени или кои нови ефекти чрез доразвитие на метода допълнително отчетени?

Накрая бих искал да се върна на *интерпретацията* на някои от резултатите на автора разглеждани от него като потвърждение на нарушаване на закона за запазване на енергията. Добре известно е, че в рамките на квантовата механика съотношението на неопределеност на Хайзенберг за енергията ограничава точността, с която тя е определена ако пребиваването и в съответното състояние е краткотрайно. Освен това системата няма определена стойност на своята енергия преди нейното измерване. В дисертацията се разглеждат събития, при които след краткотрайно въздействие системата е оставена да еволюира до състояние с добре определена енергия. Тя не е имала добре дефинирана енергия в началния момент. Затова описанието на случващото се в термини на нарушаване на закона за запазване на енергията е, според мен, *неправомерно*. Не е дефиниран и дискутиран и процеса на измерване на квантовата енергия, имащ свои допълнителни характерни времена, и др. За разлика от твърдението за квантовата енергия приемам, че може да се говори за несъответствие на определената за наблюдавано явление класически аналог на неговата квантовата енергия в различни стадии на неговата еволюция, т.е. до нарушаване на класическия аналог за закона за запазване на енергията. Интерпретацията на квантовата механика е била, и за определени въпроси все още е, обект на разгорещени дискусии. Бих искал да чуя мнението на кандидата за закона за запазване на енергията в светлината на направените по-горе бележки.

Общото ми заключение по отношение на приносите е, че те са достатъчни за присъждането на научната степен „доктор на науките” на кандидата.

6. Автореферат

Авторефератът, с общ обем от 59 страници, отразява достатъчно пълно изследванията, изложени в дисертацията и съдържа основните резултати, получени при тези изследвания.

7. Въпроси, забележки и препоръки

Част от въпросите, които възникнаха у мен при четене на материалите на дисертацията, бяха вече формулирани в параграфи 4 и 5. Освен тях, аз имам и следните допълнителни забележки, въпроси и препоръки към нейния автор (някои от тях са директно свързани с вече повдигнатите въпроси):

- ▲ В дисертацията се наблюдава смесването на български и английски текстови елементи в една и съща таблица, виж например таблици 1.2, 1.3, 1.4, и 3.1, и на практика във всички фигури. След като българският е избран за език, на който дисертацията е написана, то би следвало авторът да преведе и съответните таблици на този език. Със съвременните програми за обработка на образи преработката на тестовите компоненти по осите на графиките (примерно „mean energy“ и „distance“ във фиг. 2.14; нямам предвид математическите символи) също е просто един не особено приятен, но не и невъзможен или прекалено времепоглъщащ проблем.
- ▲ Изненадващо авторът е подбрал за дисертацията си такива свои работи от които “най-съвременната“, в тази бурно развиваща се област, е от 2007 г. (работа № 16), а последната такава публикувана в списание с ИФ е от 2006 г. (работа № 5). Авторът би трябвало да обясни защо.
- ▲ Дисертантът дълго време е бил в чужбина, поради което използваната в дисертацията терминология понякога (примерно “квантизация“ - стр. 12 и 25, вместо “квантуване“) се отличава от традиционната за българските научни среди терминология. Има, разбира се, и изречения в които появата на възвратни местоимения, характерни за немския, предават трудно разбираем смисъл на изречението на български. Собственият ми опит показва, че с известни усилия и с течение на времето този проблем изчезва. Поради това, аз няма да правя подробен анализ на използваната терминология, и др.
- ▲ Препоръката ми е да бъдат продължени изложените в дисертацията изследвания и особено тези от глава 3, които считам за много перспективни.

8. Лични впечатления.

Нямам много лични впечатления от г-н Недялков.

9. ЗАКЛЮЧЕНИЕ.

Оценката ми за дисертационния труд, автореферата, научните публикации и научните приноси на доц. д-р Михаил Христов Недялков е положителна.

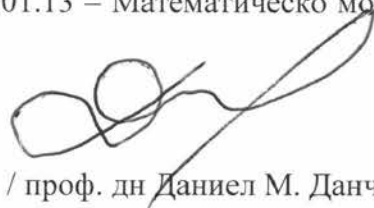
Представеният дисертационен труд отговаря напълно на изискванията на ЗРАСРБ, Правилника за прилагане на ЗРАСРБ и Правилника за специфичните условия за

придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в института по информационни и комуникационни технологии - БАН.

Получените в дисертацията резултати ми дават основание да предложа да бъде присъдена научната степен „доктор на науките” на **Михаил Христов Недялков** в област на висше образование: 4. Природни науки, математика и информатика, професионално направление: 4.5 Математика, научна специалност: 01.01.13 – Математическо моделиране и приложение на математиката.

23.09.2011
Гр. Лос Анджелис
Калифорния, САЩ

Подпис:



/ проф. дн Даниел М. Данчев /