

## Рецензия

по конкурса за заемане на академичната длъжност Доцент  
в Института по Информационни и Комуникационни Технологии БАН  
по спец. 01.01.13. “Математическо моделиране и приложения на математиката (приложения  
в микроелектрониката)”, професионално направление: 4.5 Математика,  
обявен в ДВ бр. 86/17.10.2014 г.  
с единствен кандидат асист. д-р Жан-Мишел Селие

Рецензент: проф. д-р Стефан К. Стефанов, Институт по механика БАН

### 1. Обща характеристика на научните резултати

Кандидатът Жан-Мишел Селие е представил за конкурса за Доцент списък от 25 научни публикации, излезли от печат. В списъка са отбелязани още три публикации, които са в процес на рецензиране. От направената проверка установих, че първата от тях е вече приета. Нейният импакт-фактор е отчетен в общия импакт-фактор на публикациите на кандидата. За рецензиране обаче приемам статиите, представени от автора с пълен текст, с които участва в конкурса. От представените публикации 14 с статии в списания с импакт-фактор IF и SJR, като общия импакт-фактор е 26.8. В 15 публикации д-р Селие е водещ автор ( първи в списъка на авторите). Особено впечатление прави броят на публикуваните 16 статии в топ-списания и трудове на престижни международни конференции от 2013 година досега, което съвпада с периода на работата му в Института по Информационни и Комуникационни технологии. Основните му работи са в съавторство, но това по никакъв начин не омаловажава неговия принос. В сложната област на математическо моделиране на процеси на електронен транспорт в микроелектрониката, изследванията изискват комплексен подход и знания от различни области на приложната математика и физиката като квантова механика, динамика на системи от много частици и различни числени методи. За кандидата е важно да се отбележи, че основните негови интереси в последните години покриват проблемите, свързани с разработване и приложение на метод Монте Карло за моделиране на електронен транспорт в различни нано-измерни конфигурации с отчитане на квантово-механичните ефекти – една изключително трудна област, в която в последно време са получени съществени резултати и кандидатът има решителен принос за това.

Разгледаните научни проблеми и решаваните задачи в представените публикации са в рамките на научната специалност на обявения конкурс 01.01.13 Математическо моделиране и приложение на математиката.

### 2. Приноси в представените за рецензиране работи

Във времето, научната дейност и публикациите на д-р Жан-Мишел Селие могат ясно да бъдат групирани в рамките на два времеви периода: първата група публикации включва резултати публикувани в периода 2004-2012, а втората – резултати публикувани през 2013-досега, през който кандидатът работи като изследовател в рамките на Европейският проект EC FP7 Project AComIn(FP7-REGPOT-2012-2013-1) и асистент в ИИКТ БАН. Тъй като, за целите на конкурса смятам по-важна втората група публикации, кратко ще отбележа резултатите получени през първия период, а по-подробно ще разгледам научните приноси на кандидата в публикациите от втория.

Подредбата на публикациите е в обратен на времето на публикуване ред, като под номер едно е последната по време публикация, под номер 25 – първата публикувана. Поради тази причина, за да следвам хронологията на научното развитие на д-р Селие ще коментирам публикациите, представени в списъка, в обратен ред.

Към първата група принадлежат публикации [17-25]. Основните научни приноси на кандидата в този период се отнасят до разработка, адаптиране и приложение на различни модели и числени методи за изследване на електронния транспорт в различни полупроводникови устройства. Моделите на взаимодействие на частиците са изградени на базата на уравнението на Болцман за транспорт на електрони.

В статия [25] моделът на енергетичен транспорт, който се базира на принципа на максималната ентропия МЕР се прилага към електронния транспорт в 2D полупроводникови устройства на силиконова основа. Числените решения са получени с помощта на метод на крайните елементи.

Същият модел с промяна на някои специфични елементи като използване на параболична или непараболична енергетична лента се прилага съответно в [24] и [22,23]. Общо описание на числения метод с използване на крайни елементи от смесен тип, приложен в предишните статии, е дадено в [21].

В статия [20] е направена класификация на симетриите в различни дрейф-дифузионни макроскопични модели на движение на заряди в полупроводници. Като резултат са получени редуцирани системи от уравнения и техните точни решения.

Работа [19] представя пакет програми NEMO 5 за числено моделиране на нано електронни структури, в чиято разработка кандидатът е взел участие.. Математическият модел е базиран на самосъгласуваната система от уравнения на Шрьодингер и Поасон. Изчисленията се изпълняват като се използва мултимасщабен подход, като електронната плътност се получава на базата на смес от квантови и полукласически модели. Това позволява да се симулират големи структури, където численото решение на уравнението на Шрьодингер, изискващо интензивни изчисления, е ограничено до централните части на изследваната област.

Работа [18] представя друг пакет Archimedes, един от авторите на който е д-р Селие. Archimedes е свободно разпространяван пакет за числено симулиране на действието на полупроводникови устройства по метод Монте Карло. метод се основава на представата за движението на електроните като частици в субмикронни устройства и използва транспортното уравнение на Болцман. Ще отбележим едно важно обстоятелство, което е важно, за да се оценят приносите на кандидата в последните години. Този поход не може да се прилага в ситуации, когато квантовите ефекти са важни.

В публикация [17] се описва по-нататъшното развитие на софтуерния пакет NEMO 5, описан в работа [19].

Втората група от статии [1-16] е с голям брой статии публикувани в рамките на последните 2 години в едни от най-престижните научни списания по изчислителна математика и физика. Този факт говори сам по себе си за качеството на публикуваните резултати и приносите в тях. Тази плодотворна научна дейност на кандидата съвпада с включването му в международната групата от учени работещи в Австрия, България и САЩ върху разработката на Монте Карло методи за пресмятане на електронния транспорт в полупроводници с отчитане на квантово-механичните ефекти на базата на Вигнеровия формализъм, който се явява алтернатива на подхода с използване на уравнението на Шрьодингер. Особено активна е дейността на д-р Селие в групата на проф. И. Димов като участник в Европейския проект ЕС FP7 Project AComIn(FP7-REGPOT-2012-2013-1) и асистент в ИИКТ БАН. От публикациите е видно, че д-р Жан-Мишел Селие внася една свежа струя в научната дейност на групата и допринесъл за създаването на един нов Монте Карло подход, като е решил ключови проблеми на метода при алгоритмичната интерпретация на квантово-механичните процеси. Трябва да се отбележи като безспорен принос факта, че преди създаването на Вигнеровия МК метод по думите на кандидата не е съществувал метод, който освен качествено да реши по надежден количествен начин базисните уравнения на квантов транспорт.

В статия [16] е описан общия подход за привеждане на Вигнеровата квантова механика в термините на динамиката на квази-частици, при което основните квантови явления могат да

бъдат моделирани като свободно движение, генериране, аниhilация (унищожение) и моделиране на други атрибути на частици. Този подход е проверен чрез Монте Карло симулация в граничния преход към смесена квантово-класическа еволюция при стъпка на квантуване  $\hbar \rightarrow 0$ .

Работа [15] представя новия Монте Карло алгоритъм, който реализира квантовия транспорт. В основата на алгоритъма е заложено преформулирането на Вигнеровото уравнение в интегрално уравнение на Фредхолм, чието решение може да се представи в ред на Нойман. Отделните траектории на квази-частиците в метод Монте Карло внасят своя принос към съответните членове на реда на Нойман. За симулиране на разсейването на частиците Вигнеровия потенциал се представя в дискретна форма. В дискретни интервали от еволюцията се разиграва взаимодействие на частиците с Вигнеровия потенциал, при което се раждат двойки белязани частици с противоположен знак които получават моменти със съответните нива в дискретното пространство на моментите. Оригиналната частица също продължава своето движение. Този процес води до лавинообразно увеличаване на частиците, което на пръв поглед е недостатък на метода. Обаче, на определени интервали по времето се извършва проверка и двойките частици в дадена пространствена клетка с обратни знаци аниhilират (унищожават взаимно) тъй като приносят в оценката на съответните функционали е нулев. Това дава възможност броят на частиците да остане ограничен. В работата е представен един тестов пример.

Процедурата на аниhilация и нейната роля е анализирана по-подробно в публикация [14].

2D Вигнерова Монте Карло симулация на еволюцията и разпространението на вълнов пакет в MOSFET полеви транзистор е разгледана в работа [13]. Показано е, че симулацията отразява както квантовите, така и преходните явления на захващане и разсейване на заряди. В [12] подробно е разгледан еволюционният 2D модел базиран на Вигнеровия формализъм използван в [13].

В [11]. новия Вигнеров 2D Монте Карло метод е приложен за изследване на декохерентността на вълнови пакети – един важен проблем на квантовия транспорт. Симулиран е дифузионен процес, който внася случайност в разпределението на вълновия вектор. Основното заключение е, че въвеждането на случаен фактор е първопричината за получаване на декохерентност и необратимост на квантовия процес. Разглеждания проблем има далечен прицел свързан с изследване на теоретичните възможности за създаване на устройства за квантови изчисления ( т.н. квантови компютри), пречка за които е възникването на явлениято декохерентност.

В [10] с помощта на Вигнеровия 2D МК метод се изследва еволюцията на единичен вълнов пакет в полеви транзистор. Разглежда се динамиката на носителите на заряда в присъствие на разсейващи центрове. Получените резултати се сравняват с резултатите от еволюцията на системата получени с помощта на класическото Болцманово уравнение.

В [9] е представено сравнение на резултатите, получени с помощта на Вигнеровия 2D МК метод и численото решение на уравнението на Шрьодингер за тестовия пример на взаимодействие на Гаусов вълнов пакет с потенциална бариера. Получено е много добро съвпадение на резултатите на двата метода за период по-голям от 40 пс. За сведение, по-ранните МК схеми осигуряват само качествено подобно поведение.

В статиите разгледани до тук, Вигнеровият МК метод се гради на концепцията на модела на единична частица (single body) (виж например [16] [9]). Следващите основни статии разширяват приложението му върху системи с повече свързани (many-body) частици, което е голяма стъпка напред към моделиране на по-реални нано-системи.

Статия [8] е основна за по-нататъшното развитие на Вигнеровия МК метод за изследване на много-частични квантови системи. Един от възможните пътища е използването на така наречената теория на функционала на плътността (Density Functional Theory -DFT), която е основен инструмент на изчислителната квантова химия. В работа [8] се предлага вариант на стандартната DFT, в който уравненията на Шрьодингер за единичните електрони във

формата на Kohn – Sham система от уравнения се заменя от еквивалентна система от уравнения на Вигнер за единичните електрони, които се решават с помощта на Вигнеровия МК метод, разработен от авторите. За валидизиране на подхода се изследват три различни квантови системи: атом на литий, атом на бор и водороден атом в две различни конфигурации (електрони близо до ядрото и далеч от ядрото на атома). Резултатите от симулациите на еволюцията на водородния атом са сравнени със стандартни DFT изчисления. Показано е много добро количествено съвпадение. Разширението на приложението на Вигнеровия МК метод отваря път за една широка област за числени изследвания в квантовата химия.

В работа [7] с Вигнеровия МК метод се изследва конкретен проблем на движение на вълнови пакети през подредени и неподредени атоми на добавки в полупроводници, описвани с помощта на потенциали на Колумб. Получени са интересни резултати.

Статия [6] представя сравнение на решения, получени с пълния Вигнеров МК метод, представен в по-горните публикации, с тези получени чрез разлагане на електростатичния потенциал, подход успешно използван при едномерни задачи за изследване на еволюцията на вълнови пакети. Получени са много добри съвпадения на резултатите за еволюция на Гаусов вълнов пакет.

Статия [5] представя разширението на Вигнеровия МК за изследване три-измерни системи и отчитане на влиянието на вибрациите на кристалната решетка на полупроводника. За целта се разглежда уравнението на Вигнер-Болцман и МК алгоритъма серазширява с отчитане на разсейването между електрони и фонони. Разработеният преди подход за извеждане на Монте Карло алгоритъма тук се адаптира за уравнението на Вигнер-Болцман, при което уравнението се дефинира в съответствие с полудискретното фазово пространство. По този начин Вигнеровия МК с белязани частици се обобщава за уравнението на Вигнер-Болцман. Като пример се разглежда еволюцията на вълнов пакет при взаимодействие с решетката при различни температури и енергии. Тази статия отново демонстрира големите възможности на разработения МК метод да се адаптира за най-разнообразни задачи, в които се отчита квантовия транспорт.

Работа [4] дава тласък на по-нататъшно развитие на метода за изследване на многочастични системи. Тук се разглежда варианта на симулиране *ab-initio*, което означава следвайки първите принципи на квантовата механика. По същество това представлява обобщение на едночастичния Вигнеров МК в многочастичен ВМК метод. За целта се използва връзката на формалното решение на многочастичното уравнение на Шрьодингер с квази-функцията на разпределение на Вигнер чрез обратимата трансформация на Вигнер-Вейл. Като се приложи тази трансформация върху многочастичното уравнение на Шрьодингер се получава съответното многочастично уравнение на Вигнер. Както преди, многочастичното уравнение се преформулира върху полу-дискретното фазово пространство на координатите и моментите. След това полученото уравнение се привежда във формата на интегрално уравнение на Фредхолм от втори род. Дефинира се редът на Нойман и по-нататък се следва разработения вече подход за едночастичното уравнение. Разгледани са няколко примера на движения на два независими вълнови пакета, две взаимно зависими частици и др. Всички резултати показват, че разработеният многочастичков Вигнеров МК метод с белязани частици е надежден и ефективен.

В работа [3] се прави анализ на чувствителността на Вигнеровия МК метод с белязани частици по отношение на дискретизацията на фазовото пространство. Това е важна задача която определя надеждността на числения метод. За голям набор от възможни дискретизации се демонстрира стабилността и надеждността на метода.

В статия [2] многочастичковия Вигнеров МК метод се доразвива за приложение в случая на неразличими частици от типа на фермионите. Показано е, че Вигнеровия формализъм включва разглеждането на неразличими частици по един естествен път. Представени са няколко примера на симулации, които потвърждават ефективността и надеждността на метода.

Заглавието на последната статия [1] подсказва за целта на работа. Солотроникс е ново понятие и означава (solitary dopant optoelectronics), което е нов клон на електрониката, разглеждащ теорията и методите за манипулиране на единични добавъчни атома в полупроводникови материали на атомно ниво. Представени са резултати от симулация на няколко примера в тази нова област, получени с помощта на Вигнеровия Монте Карло метод с белязани атоми.

Обобщавайки значението на приносите на Жан-Мишел Селие, мога да отбележа, че разработения нов Вигнеров Монте Карло метод намира и ще намери още по-голямо приложение в много области на квантовата физика и химия и свързаните с тях технологии.

Приемам напълно справката на кандидата за научните му приноси в последните години. Нямам забележки по неговата научна дейност

### 3. Публикации, цитирания и международен отзвук

Научните трудове на Жан-Мишел в съавторство с утвърдени учени от Италия, САЩ, Австрия, Англия и България, са публикувани в по-голямата си част в реномирани международни списания, особено това се отнася за втория му период 2013-досега, когато за кратко време са публикувани редица статии в топ-списания като Journal of Computational Physics, Physica A, Journal of Applied Physics, Computer Physics Communications, Mathematics and Computers in Simulations, Journal of Computational and Applied Mathematics и др.

Представените цитирания на брой 23 са на статии от първия период 2004-2012. Една бегла проверка показва, че вече има цитирания на статии публикувани в периода 2013-2015. Няма съмнение, че в най-скоро време броят на цитиранията ще нарасне значително.

От справката на кандидата се вижда, неговите доклади са посрещани с голям интерес от научната общност и от много учени е изявено желание за бъдещо сътрудничество.

### 4. Учебно преподавателска дейност

Д-р Селия има опит като асистент-професор в Purdue University, USA 2008-2012 г 6 месеца като асистент в ИИКТ БАН.

Кандидатът активно популяризира своите достижения в на своя сайт

[www.nano-archimedes.com](http://www.nano-archimedes.com) в интернет. Специално искам да отбележа неговите 5 видео-лекции записани на сайта <http://www.nano-archimedes.com/lectures.php> , който демонстрират неговите отлични преподавателски качества.

### 5. Заклучение

Представените документи и анализът, направен в предните точки на рецензията, категорично показват, че кандидатът по обявения конкурс д-р Жан-Мишел Селие отговаря напълно на изискванията на ЗРАСРБ, Правилника за прилагане на ЗРАСРБ и Правилника за устройството, дейността и вътрешния ред в Института по Информационни и Комуникационни Технологии при БАН. Постигнатите научни резултати ми дават основание да предложа кандидатът д-р Жан-Мишел Селие да бъде избран за доцент в Института по Информационни и Комуникационни Технологии при БАН в област на висшето образование: 4. Природни науки, математика и информатика, професионално направление: 4.5 Математика, научна специалност: 01.01.13 Математическо моделиране и приложение на математиката. Моето заключение за заемане на обявената по конкурса академична длъжност „Доцент“ от д-р Жан-Мишел Селие е ПОЛОЖИТЕЛНО.

13.02.2015

Подпис:

София

/