

СТАНОВИЩЕ

за материалите, представени за участие в конкурс за заемане на академичната длъжност "доцент" за нуждите на секция "Паралелни алгоритми" по научната специалност 01.01.13 „Математическо моделиране и приложение на математиката (приложения в микроелектрониката)”

Конкурсът за доцент е обявен от ИИКТ-БАН в Държавен вестник, бр. 86 / 17.10.2014 г. и в сайта на ИИКТ-БАН.

Единствен кандидат е д-р Жан-Мишел Селие.

Член на научното жури: проф. д.н. Ана Йовкова Пройкиова, Физически факултет, Софийски университет

1. Обща характеристика на научно-изследователската и научно-приложната дейност на кандидата.

Научните изследвания на кандидата са в областта, по която е обявен конкурса.

Квантовият електронен транспорт е тема, към която има нестихващ интерес в продължение на десетилетия, поради фундаменталните трудности за намиране на решения за многочастични задачи и поради технологичния напредък в експерименталните изследвания, които ограничиха използването на груби приближения в пресмятанята. Създаването на програмируеми модели, описващи 'молекулни машини', които са в основата на нано-електрониката е важна и интересна задача в съвременната наука.

Избраният от кандидата Вигнеров подход към квантовата механика е подходящ за постигане на научните цели на секцията "Паралелни алгоритми". Методът Вигнеров Монте Карло е развит в дълбочина от кандидата, който е създал квантов симулатор, представляващ интерес и за изследователи от други групи.

Кандидатът е представил 25 публикации и 3 ръкописа, които са в процес на рецензиране. Публикациите са в специализирани научни списания. Метриката на публикациите е следната: 13 статии са публикувани в международни списания с импакт фактор, 4 статии в международни списания; 8 публикувани доклади в реферирани сборници от международни конференции.

Представените работи не са използвани в предходни конкурси.

2. Основни научни и научно-приложни приноси.

Приносите на д-р Селие са в областта на изчислителната математика и физика и в математическото моделиране. В следващото изложение предполагам, че личният принос на кандидата в представените колективни работи е равностоен с приноса на останалите автори.

Работите

M. Nedjalkov, P. Schwaha, S. Selberherr, J.M. Sellier, D. Vasileska, Wigner quasi-particle attributes: an asymptotic perspective, Appl. Phys. Lett. 102 (2013) 163113.

J.M.Sellier, M. Nedjalkov, I. Dimov, S. Selberherr, A Benchmark Study of the Wigner Monte Carlo Method, Monte Carlo Methods Appl., De Gruyter, 2014

са от особен интерес за симулиране на едночастичното уравнение на Вигнер с помощта на метода Монте Карло, основан на виртуални частици със знак –

една плодотворна концепция на кандидата и неговите съавтори, позволяваща да се въведе зависимост от времето в квантови симулации. В работата:

J.M. Sellier, I. Dimov, The many-body Wigner Monte Carlo method for time-dependent ab-initio quantum simulations, J. Comput. Phys. 273 (2014) 589–597.

е приложена схемата към система от различни, безспинови частици. Тези ограничения поставят условия при прилагане на метода към реалистични физични системи. В работата “On the simulation of indistinguishable fermions in the many-body Wigner formalism”, J.M.Sellier, I.Dimov, Journal of Computational Physics 280(2015)287–294 е направен важен ход - условието за безспинови частици е премахнато.

Имам въпрос за смисъла на подчертаното изречение, взето от раздел 3.1 Pauli exclusion principle на обсъжданата статия: “Indeed, this experiment is equivalent to pinching two electrons with same energy against each other and, accordingly, a lower probability is developed in the central area of the phase-space, preventing the two particles to be in the same position with the same energy. This is a proof of the presence of the Pauli exclusion principle during the simulation...”. Какво искат да кажат авторите, че симулацията им не разрушава принципа на Паули ли? {бележка: има печатна грешка в съвместната функция в 3.1}. Когато се зададе антисиметрична съвместна функция, принципът на Паули се изпълнява. Интересен би бил коментар по въпроса.

Обсъжданата статия предлага много добър анализ на изчислителната сложност на проблема, както и на трудностите, които възникват при отчитане на времевата зависимост в подинтегралното ядро.

Едно интелигентно решение на задачата за електронния транспорт в полупроводници при наличие на легиращ атом е предложено в работата:

J.M. Sellier, I. Dimov, Wigner–Boltzmann Monte Carlo method applied to electron transport in the presence of a single dopant, Comput. Phys. Commun. 185 (2014) 2427–2435.

Теоретичното изучаване на системата силиций-фосфорен атом е интересно, тъй като въпросната система е обещаващ квантов компютър, както и авторите отбелязват.

Принос към изчислителните методи е и работата

J.M. Sellier, I. Dimov, A Wigner Monte Carlo approach to density functional theory, J. Comput. Phys. 270 (2014) 265–277,

която дава подход за време-зависими симулации на химически системи в присъствие на отразяващи и поглъщащи граници. Това е полезно като се имат пред вид трудностите при прилагане на теорията на функционала на електронната плътност при такива гранични условия.

В работите, 21-23 и 25 от списъка на кандидата, е използвана техниката на крайните елементи (finite-element technique), която е подходяща за класически системи и традиционно се използва при моделиране на полупроводникови устройства.

Като имам пред вид, че конкурсът е за хабилитация, оценявам много добре фактът, че кандидатът е подготвил за публикуване и самостоятелната работа J.M. Sellier, A Signed-particle Formulation of Non-relativistic Quantum Mechanics, изпратена в Journal of Computational Physics през 2014.

3. Отражение на научните публикации на кандидата в българската и чуждестранната литература.

Представен е списък с 23 цитирания, но в списъка не е посочено кой цитат за коя работа на автора се отнася.

Като имам пред вид културата на цитиране в математическите среди, не е учудващо, че броят на цитиранията на работите не е особено голям. Предполагам, че с времето тези работи ще станат широко известни и ще бъдат използвани от научната общност, когато наноелектрониката стане ежедневие.

4. Критични бележки

В представените материали не открих данни за работата на кандидата с по-млади изследователи. Според мен е добре кандидатът да предаде уменията си на следващо поколение изчислители.

Похвално е, че д-р Селие е написал резюме на български език, защото демонстрира желание за приобщаване. Текстът обаче не е добър и е било правилно да се обърне към колега с познания по български език, който да коригира изложението.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Качеството на научните приноси в публикациите, представени в този конкурс, както и фактът, че кандидатът удовлетворява всички необходими изисквания на ЗРАСРБ, ППЗРАСРБ, ПБАН, Правилника за специфичните условия за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в ИИКТ-БАН, ми позволява да предложа д-р Жан-Мишел Селие да бъде избран за „доцент“ по специалността 01.01.13 „Математическо моделиране и приложение на математиката (приложения в микроелектрониката)“ за нуждите на секция "Паралелни алгоритми", ИИКТ-БАН.

09.02.2015 г.