

# **Научном већу Института за физику у Београду**

## **Извештај комисије за избор др Марка Младеновића у звање научни сарадник**

На основу захтева који је др Марко Младеновић поднео 2. фебруара 2017. године, Научно веће Института за физику у Београду именовало нас је у комисију за избор др Марка Младеновића у звање научни сарадник.

Прегледом материјала који нам је достављен, као и на основу личног познавања кандидата и увида у његов рад и публикације, Научном већу Института за физику у Београду подносимо овај извештај.

### **Биографски подаци о кандидату**

Др Марко Младеновић је рођен 2. септембра 1988. у Зајечару. Завршио је Математичку гимназију у Београду 2007. године као носилац Вукове дипломе. Исте године уписује Електротехнички факултет у Београду. Дипломирао је на Одсеку за физичку електронику као студент генерације 2011. године. Дипломски рад под називом “Монте Карло симулације органских полупроводника” урадио је под менторством др Игора Станковића са Института за физику у Београду. Мастер студије на истом факултету завршио је 2012. године на модулу Наноелектроника, оптоелектроника и ласерска техника. Мастер рад под називом “Атомска и електронска структура граница између кристалних домена у нафталину” урадио је на Институту за физику у Београду под менторством др Ненада Вукмировића. Исте године уписује докторске студије на модулу Наноелектроника и фотоника.

Кандидат је започео истраживачки рад на Институту за физику у Београду у Лабораторији за примену рачунара у науци почетком августа 2011. године, а запослен је од 1. новембра 2012. године. Ангажован је на пројекту Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије ОН171017 “Моделирање и нумеричке симулације сложених вишечестичних система”. Од августа 2011. до јула 2015. године био је ангажован на ФП7 пројекту Европске комисије “Електронски транспорт у органским материјалима” под руководством др Ненада Вукмировића. Његова област истраживања је испитивање атомске и електронске структуре органских полупроводника.

Кандидат је учествовао на неколико међународних научних школа: у Лез Ушу (Француска), Трсту (Италија), Крутину (Пољска) и Солуну (Грчка). Презентовао је своје резултате на више међународних конференција: у Регензбургу (Немачка), Солуну (Грчка), Лилу (Француска), Београду (Србија) и Барги (Италија). На конференцији Европског друштва за материјале (E-MRS Spring Meeting 2014) у Лилу награђен је за најбољег младог истраживача у оквиру секције Компјутерско моделовање органских полупроводника. Започео је сарадњу са експерименталном групом проф. Ива Гертса са Слободног универзитета у Бриселу. До сада је објавио

6 радова у међународним часописима, од тога 1 рад у међународном часопису изузетних вредности и 4 рада у врхунским међународним часописима.

Докторску дисертацију под називом “Електронска својства органских полупроводника на границама домена”, урађену под руководством др Ненада Вукмировића, одбранио је 19. јануара 2017. на Електротехничком факултету у Београду. Од марта 2017. године кандидат ће боравити на постдокторском усавршавању на Швајцарском федералном технолошком институту у Лозани (EPFL), у групи проф. Урсуле Ротлисбергер.

## **Преглед научне активности кандидата**

Марко Младеновић је започео свој научно–истраживачки рад на Институту за физику у Београду у Лабораторији за примену рачунара у науци 2011. године. Током свог досадашњег рада бавио се испитивањем атомске и електронске структуре органских полупроводника. Конкретније, бавио се испитивањем различитих типова граница између домена у органским полупроводницима и феномена који се дешавају на границама. Његово досадашње истраживање обухвата 4 теме: (1) прорачун електронских стања на границама малих углова у поликристалним органским полупроводницима на бази малих молекула, (2) испитивање утицаја термалне неуређености на електронске особине уређених конјугованих полимера, (3) прорачун електронских стања на граници кристалног и аморфног домена у конјугованим полимерима и (4) рачунање спонтане поларизације индуковане бочним ланцима у уређеном поли(3-хексилтиофену) (P3HT). За добијање атомске структуре испитиваних система кандидат је користио Монте Карло симулације, за које је сам развио кодове. За прорачун електронске структуре користио је методе базиране на теорији функционала густине.

Кандидат Марко Младеновић се најпре бавио испитивањем електронске структуре границе између кристалних домена у органским полупроводницима на бази малих молекула. Реални органски полупроводници на бази малих молекула су поликристални, тј. садрже кристалне домене различитих оријентација. Експериментално је утврђено да граница између кристалних домена лоше утиче на особине материјала али механизам утицаја није разјашњен. Као пример органских полупроводника на бази малих молекула коришћен је нафталин. За генерисање електронске структуре границе између кристалних домена у нафталину коришћен је Монте Карло алгоритам, који је кандидат имплементирао у свом коду писаном у програмском језику C. За прорачун електронске структуре коришћен је метод склапања наелектрисања, који се базира на теорији функционала густине. На основу прорачуна електронске структуре за мале системе закључено је да на граници долази до формирања локализованих стања замки која се налазе на паровима молекула између којих је растојање мало. Такође, утврђено је да је енергија стања корелисана са растојањем између молекула. Та корелација је коришћена за прорачун густине стања замки за велике системе. Касније, кандидат је поновио сличан поступак за ВТВТ и ditBu-ВТВТ молекуле. Резултати за ВТВТ молекула су слични онима за нафталин, док код ditBu-ВТВТ молекула не долази до формирања стања замки због бочних група које спречавају да се молекули нађу на малом растојању.

Познато је да уређени конјуговани полимери исказују значајну неуређеност атомске структуре на собној температури. Кандидат је испитивао утицај термалне неуређености на електронске особине уређеног полимера РЗНТ. За генерисање равнотежне атомске структуре на собној температури, поново је коришћен Монте Карло алгоритам. За прорачун електронске структуре коришћен је метод склапања наелектрисања и метод преклапајућих фрагмената. Посебно је разматран утицај неуређености бочних ланаца, главних ланаца као и кумулативни ефекат неуређености бочних и главних ланаца. Утицај је квантификован прорачуном укупне локализације носилаца, локализације на различитим ланцима и густине стања. Закључено је да неуређеност главних ланаца доводи до локализације носилаца на неколико, најчешће два ланца. Кандидат је поновио симулације на температури од 100 К, где су добијени слични резултати онима за 300 К.

Реални конјуговани полимери садрже измешане кристалне и аморфне домене. Кандидат је испитивао електронску структуру границе између кристалног и аморфног домена у РЗНТ. Поступак добијања атомске и електронске структуре је био истоветан ономе коришћеном за прорачун ефеката термалне неуређености. Кандидат је разматрао неколико типова границе: (1) оштру границу између домена, (2) границу са неуређеним доменом између кристалног и аморфног домена и (3) границу сачињену од продужених ланаца који припадају и кристалном и аморфном домену. Резултати су показали да независно од типа границе највиша електронска стања у валентној зони припадају кристалном домену и да не долази до формирања стања у енергијском процепу, нити стања која припадају и једном и другом домену. Израчуната је разлика највиших нивоа у кристалном и аморфном домену. Разлика је значајно мања у случају границе сачињене од продужених ланаца, јер је тај тип границе реалистичнији.

Коначно, кандидат је испитивао ефекте спонтане поларизације у уређеном РЗНТ. Најпре је извршен прорачун спонтане поларизације у јединичној ћелији РЗНТ помоћу теорије функционала густине. Кандидат је закључио да је узрок значајне вредности спонтане поларизације дуж главног ланца несиметричан распоред бочних ланаца. Потом је кандидат израчунао спонтану поларизацију у ланцу РЗНТ на основу модела границе РЗНТ–вакуум. С обзиром да се овако добијена поларизација слагала са оном добијеном помоћу теорије функционала густине, закључено је да је могуће користити овакав модел за прорачун спонтане поларизације у већим системима. Кандидат је потом израчунао спонтану поларизацију у термално неуређеном РЗНТ на собној температури. На крају, кандидат је израчунао електронску структуру границе између кристалног и аморфног РЗНТ у случају када је граница нормална на правац главних ланаца у кристалном домену. Због ефеката спонтане поларизације, највиша стања у валентној зони су конфинирана са једне стране кристалног домена.

## Елементи за квалитативну анализу рада кандидата

### 1. Квалитет научних резултата

#### 1.1 Значај научних резултата

Кандидат се у току досадашњег рада бавио испитивањем атомске и електронске структуре органских полупроводника, материјала који су већ нашли комерцијалну примену у диодама које емитују светлост на екранима мобилних телефона и телевизора, а очекују се и друге примене ових материјала у електронским и оптоелектронским направама. Ипак, због сложености структуре органских полупроводника, многа питања у овој области су још увек отворена. Кандидат је дао значајан допринос разумевању електронске структуре границе између кристалних домена у органским полупроводницима на бази малих молекула. Његови резултати привукли су и пажњу експерименталних група, па је као резултат тога започета сарадња са експерименталном групом са Слободног универзитета у Бриселу. Кандидат је по први пут одвојено испитивао ефекат термалне неуређености бочних и главних ланаца на електронске особине уређених конјугованих полимера. Такође, кандидат је дао и микроскопски увид у електронску структуру границе између кристалних и аморфних домена у конјугованим полимерима. Кандидат је утврдио и постојање спонтане поларизације у уређеном полимеру поли(3-хексилтиофену) и дао процену њене вредности на нултој и собној температури.

#### 1.2 Параметри квалитета часописа

Кандидат др Марко Младеновић је објавио укупно 6 радова у међународним часописима и то:

- 1 преглени рад у међународном часопису изузетних вредности Advanced Functional Materials (IF = 11.382),
- 3 рада у врхунском међународном часопису The Journal of Physical Chemistry C (IF = 4.509 за два рада, IF=4.834 за један рад),
- 1 рад у врхунском међународном часопису Physical Chemistry Chemical Physics (IF = 4.493),
- 1 рад у међународном часопису Physica Scripta (IF = 1.296).

Укупан импакт фактор објављених радова је 31,023.

#### 1.3 Подаци о цитираности

Према бази Web of Science, радови др Марка Младеновића су цитирани укупно 20 пута, од чега 12 пута изузимајући ауоцитате.

Прилог: Цитираност радова према бази Web of Science.

#### 1.4 Награде

Током досадашњег рада кандидат је добио следеће награде:

- награда за најбоље младог истраживача на конференцији Европског друштва за материјале (European Materials Research Society Spring Meeting)

2014), одржаној у Лилу (Француска) у секцији Компјутерско моделовање органских полупроводника.

- награда за најбољи студентски рад на конференцији ЕТРАН 2012 одржаној на Златибору (Србија) у секцији Микроелектроника и оптоелектроника

Прилог: Докази о наведеним наградама.

### 1.5 Међународна сарадња

Међународне активности др Марка Младеновића обухватају:

- учешће на пројекту ФП7 Европске комисије “Електронски транспорт у органским материјалима” од августа 2011. до јула 2015. године
- сарадњу са експерименталном групом проф. Ива Гертса са Слободног универзитета у Бриселу.

## **2. Нормирање броја коауторских радова, патената и техничких решења**

Сви радови кандидата укључују обимне нумеричке симулације. Имајући у виду да сваки објављени рад кандидата има мање од 5 коаутора, сваки рад се рачуна са пуном тежином.

## **3. Учешће у пројектима, потпројектима и пројектним задацима**

Кандидат је учествовао на следећим пројектима:

- пројекат Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије ОН171017 “Моделирање и нумеричке симулације сложених вишечестичних система” (новембар 2012-)
- ФП7 пројекат Европске комисије “Електронски транспорт у органским материјалима” (август 2011-јул 2015)
- пројекат “High-Performance Computing Infrastructure for South East Europe’s Research Communities” (HP-SEE), коришћење компјутерских ресурса на суперкомпјутеру у Сегедину (новембар 2013 – јул 2014)

## **4. Активност у научним и научно-стручним друштвима**

### 4.1 Рецензије научних радова

Кандидат је био рецензент 1 рада у часопису Physical Chemistry Chemical Physics (IF = 4.493).

Прилог: Писмо едитора са захтевом за рецензију.

### 4.2 Организација научних скупова

Др Марко Младеновић је био члан организационог одбора конференције “The 19th Symposium on Condensed Matter Physics”, која је одржана у 2015. године у Београду.

Прилог: Списак чланова организационог комитета са сајта конференције.

#### 4.3 Педагошки рад

Кандидат је био члан комисије за преглед задатака на Државном такмичењу из физике за ученике средњих школа 2012. и 2013. године.

#### **5. Утицај научних резултата**

Утицај научних резултата кандидата се огледа у броју цитата који су наведени у тачки 1. овог одељка као и у прилогу о цитираности. Значај резултата кандидата је такође описан у тачки 1.

#### **6. Конкретан допринос кандидата у реализацији радова у научним центрима у земљи и иностранству**

Кандидат је све своје истраживачке активности реализовао у Институту за физику у Београду. Кандидат је дао кључни допринос објављеним радовима и у свим радовима је први аутор. Његов допринос се огледа у изради потребних нумеричких симулација, добијању, интерпретацији и презентацији нумеричких резултата, писању радова и комуникацији са уредницима и рецензентима часописа.

## Елементи за квантитативну оцену научног доприноса др Марка Младеновића

Остварени М-бодови по категоријама

Категорија	М бодова по раду	Број радова	Укупно М бодова
M21a	10	1	10
M21	8	4	32
M23	3	1	3
M24	2	1	2
M32	1,5	1	1,5
M34	0,5	7	3,5
M63	1	1	1
M70	6	1	6

Поређење оствареног броја М-бодова са минималним условима потребним за избор у звање научног сарадника

Минималан број М бодова потребан за избор у звање научни сарадник		Остварено
Укупно	16	<b>59</b>
M10+M20+M31+M32+M33+M41+M42	10	<b>48,5</b>
M11+M12+M21+M22+M23	6	<b>45</b>

## Закључак и предлог

Др Марко Младеновић у потпуности испуњава све услове за избор у звање научни сарадник предвиђене Правилником Министарства просвете, науке и технолошког развоја о поступку и начину вредновања, и квантитативном исказивању научно-истраживачких резултата истраживача. Током рада на докторској дисертацији остварио је оригиналне и међународно запажене научне резултате које је објавио у 1 раду М21а категорије и 4 рада М21 категорије и саопштио на већем броју конференција. За свој научни рад је добио и награде на националном и међународном нивоу.

Имајући у виду квалитет његовог научно-истраживачког рада и достигнути степен истраживачке компетентности, изузетно нам је задовољство да предложимо Научном већу Института за физику у Београду да донесе одлуку о прихватању предлога за избор др Марка Младеновића у звање научни сарадник.

У Београду, 10. фебруар 2017. год.

Чланови комисије:

др Ненад Вукмировић  
Научни саветник  
Институт за физику у Београду

др Антун Балаж  
Научни саветник  
Институт за физику у Београду

др Јелена Радовановић  
Редовни професор  
Универзитет у Београду - Електротехнички факултет