

**НАУЧНОМ ВЕЋУ
ИНСТИТУТА ЗА ФИЗИКУ
БЕОГРАД**

Предмет: Молба за покретање поступка за стицање звања научни сарадник

Научном већу Института за физику у Београду упућујем молбу да покрене мој избор у звање **научни сарадник**, а у складу са Правилником о поступку, начину вредновања и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата истраживача, Министарства просвете, науке и технолошког развоја.

Достављам:

1. Мишљење руководиоца пројекта са предлогом чланова комисије за избор у звање
2. Биографске податке
3. Преглед научне активности
4. Елементе за квалитативну и квантитативну оцену научног доприноса
5. Списак и фотокопије објављених радова
6. Уверење о одбрањеној докторској дисертацији

У Београду,
14. 09. 2017. године

С поштовањем,

др Милош Дражић

**НАУЧНОМ ВЕЋУ
ИНСТИТУТА ЗА ФИЗИКУ
БЕОГРАД**

Предмет: Мишљење руководиоца пројекта о избору др Милоша Дражића у звање научни сарадник

Др Милош Дражић је запослен у Лабораторији за мезоскопску физику Института за физику у Београду и ангажован је на пројекту основних истраживања (ОИ171033) „Електронске, транспортне и оптичке особине нанофазних материјала“, Министарства просвете, науке и технолошког развоја. Будући да испуњава све услове који су предвиђени Правилником о поступку, начину вредновања и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата истраживача, сагласан сам са покретањем поступка за избор др Милоша Дражића у звање научни сарадник.

За састав Комисије за избор у звање предлагем:

1. др Радомир Жикић, научни саветник, Институт за физику, Београд
2. др Радош Гајић, научни саветник, Институт за физику, Београд
3. др Дејан Тимотијевић, научни саветник, Институт за физику, Београд
4. др Марко Спасеновић, виши научни сарадник, Институт за физику, Београд
5. др Божидар Николић, доцент, Физички факултет у Београду

У Београду,
14. 09. 2017. године

Руководилац пројекта ОИ171033

др Радомир Жикић,
Научни саветник,
Институт за физику, Београд

СТРУЧНА БИОГРАФИЈА

Милош Дражић рођен је 06.07.1978. године у Земуну. Основну школу и Гимназију завршио је у Земуну. Физички факултет у Београду уписао је школске 1997/1998. године. Дипломски рад на тему „Пфафијанска квантна Холова стања“ под менторством др Милице Миловановић одбранио је 2008. године са оценом 10 и стекао звање: дипломирани физичар. Физички факултет је завршио са просечном оценом 9,42. Докторске студије на Физичком факултету на смеру „Физика кондензованог стања материје“, уписао је школске 2008/2009. године. У периоду 2009-2010. Милош Дражић је као стипендиста Министарства просвете, науке и технолошког развоја био ангажован на пројекту у области основних истраживања „Динамика атомских, молекулских и мезоскопских система“ (бр. ОИ141029) под руководством др Таска Грозданова. Од јануара 2011. године запослен је у на Институту за физику у Београду на пројекту Министарства просвете, науке и технолошког развоја у области основних истраживања „Електронске, транспортне и оптичке особине нанофазних материјала“ (бр. ОИ171033) под руководством др Радомира Жикића.

Током свог истраживачког рада Милош Дражић има публикован по један рад у врхунском међународном часопису **M21**, у истакнутом међународном часопису **M22**, као и по једно саопштење са међународног скупа штампано у целини **M33**, са међународног скупа штампаног у изводу **M34** и са скупа националног значаја штампаног у целини **M63**.

Докторску дисертацију под називом „Теорија електронског транспорта кроз квантне тачке и молекуле“, одбранио је 12. јула 2017. године на Физичком факултету Универзитета у Београду.

ПРЕГЛЕД НАУЧНЕ АКТИВНОСТИ

Главна област истраживања Милоша Дражића је област физике кондензованог стања, а посебно област квантног електронског транспорта кроз наноструктуре и молекуле/квантне тачке. У раду се ослања на методе аналитичког и нумеричког описа квантног транспорта кроз молекул који је постављен између две проводне електроде, користећи формализам Гринових функција дефинисаних на Келдишовој (Леонид Вениамінович Келдыш, Leonid Veniaminovich Keldysh) контури као и теорију функционала густине (DFT-density functional theory).

Минијатуризација конвенционалне полупроводничке електронике и способност манипулације појединачним молекулима као и наножицама и конструкција и контрола електронских уређаја базираних на таквим системима представља активно поље изучавања које је мултидисциплинарног карактера. Појава и развој експерименталних техника попут STM-а (STM-scanning tunneling microscope), нанолитографских поступака, break junctions, као и синтетизација проводних наножица дало је замаха интензивном теоријском изучавању области. Понашање и одговор молекула постављеног између металних електрода, тј. наножица, (најчешће златних, угљеничних или алуминијумских) на примењен константни и/или временски променљиви напон је значајно и са технолошког и са теоријског аспекта. Јачина струје, карактеристична за одређени тип молекула, би могла да представља својеврсни „отисак“, чиме би се ДНК секвенцирање могло свести на брз и јефтин поступак. Наноскопске димензије изучаваног система чине

класичан опис његових проводних особина неадекватним, па теоријско изучавање квантних ефеката може предвидети нове физичке појаве.

У току докторских студија кандидат се бавио развојем теорије временски зависног квантног транспорта која би почивала на познатој и ефикасној, нумерички имплементираној вези између формализма временски хомогених Гринових функција и теорије функционала густине. Временски хомогене гринове функције се одређују помоћу DFT-а и кодови који служе за рачунање једносмерне струје користе овако добијене временски хомогене Гринове функције. Поред тога, помоћу DFT-а се рачунају и стационарни потенцијал молекула и стационарне сопствене енергије добијене услед споја између молекула и електрода. Мала временски зависна пертурбација примењена на електроде довешће до динамичких корекција наведених временски хомогених (стационарних) величина. Циљ је био да се коришћењем линеаризоване Хартри-Фокове (GRPA-generalized random phase approximation) и линеаризоване Хартријеве апроксимације (RPA-random phase approximation), одреде динамичке корекције у функцији временски хомогених величина и да се потом развије временски зависна теорија и добије израз за динамичку струју. На тај начин би се DFT и кодови изворно развијени за рачунање једносмерне струје могли искористити и за рачунање динамичке струје. Ови кодови користе базис добро локализованих неортогоналних орбитала. Нумеричке имплементације временски зависног транспорта, описаног било уз помоћ временски зависне теорије функционала густине или коришћењем Гринових функција у реалном временском домену (пропагација Каданоф-Бајмових једначина), ослањају се на ортогонализационе схеме. Зато је избегавање ортогонализације и рад директно у неортогоналном базису био један од циљева истраживачког рада кандидата. Теорије које су развијене почивају на физичким аргументима Бутикерове (Marcus Büttiker) временски зависне транспортне теорије и појму проширеног молекула а њихово важење је ограничено на фреквенције временски зависних потенцијала који морају бити мање од плазмене фреквенције метала од ког је електрода начињена (за добре метале су плазмене фреквенције око 2-2.5PHz), па је процењена горња граница око 1200THz (250nm). Доња граница фреквенције је наметнута линеарношћу теорије и задата је неједнакошћу $ev/hv < 1$ (за амплитуду напона од око 0,1mV, доња граница је око 20GHz).

Досадашње истраживање се може поделити на две целине:

[1] Теорија временски зависне струје мале амплитуде добијене у линеарној Хартри-Фоковој апроксимацији у формализму Гринових функција у спрези са DFT-ом у ортогоналној репрезентацији.

[2] Теорија временски зависне струје мале амплитуде добијене у линеарној Хартријевој апроксимацији, где је временски зависни потенцијал проширеног молекула, преко Бутикерових карактеристичних потенцијала, у линеарној вези са спољашњим потенцијалима. Теорија је изведена у формализму Гринових функција у спрези са DFT-ом у неортогоналној репрезентацији.

У случају [1], коришћењем формализма Гринових функција у спрези са теоријом функционала густине аналитички се долази до општег изрази за струјно-напонску карактеристику система молекула постављеног између две електроде у *Хартри-Фоковој апроксимацији у ортогоналном базису*. Динамички потенцијал проширеног молекула експлицитно фигурише у добијеном изразу за струју а уводи се како би струја остала гејџ инваријантна. Овај потенцијал се самоусаглашено одређује и не се прави његов развој по спољашњим временски зависним потенцијалима електрода. Динамички потенцијал, кроз

самоусаглашену шему, имплицитно зависи од спољашњих потенцијала који представљају експериментално контролисану величину.

До поменутих резултата се долази кроз линеаризацију једначина кретања Гринових функција дефинисаних на Келдишевој контури које су репрезентоване у *ортогоналном базису*. Пропагација електрона кроз разматрану структуру молекула постављеног између две електроде описана је Гриновим функцијама а стопе расејања су описане кроз сопствену енергију која долази од споја између електрода и молекула. За временски хомогене компоненте ових величина је узето да су одређене уз помоћ DFT-а. Динамички одговор је добијен из линеаризоване једначине кретања Гринове функције и зависи од малих, временски зависних корекција две величине: сопствене енергије услед спреге између молекула и електрода и сопствене енергије услед Кулонове интеракције између електрона унутар проширеног молекула. Стандардно се намеће еквипотенцијалност електрода, а места у електродама где овакво понашање бива нарушено одређује границу објекта чије се транспортне особине изучавају: проширеног молекула. Самоусаглашеним урачунавањем динамичког одговора, задатог кроз динамичку сопствену енергију услед интеракције у *Хартри-Фоковој апроксимацији*, уводи се струја померања, решава се проблем партиције струје (део укупне струје померања се придружује струји честица једне електроде а други део струји честица друге електроде) и не уноси се додатна грешка услед самоинтеркције (мимо оне до које долази услед практичне примене теорије функционала густине). Због урачунавања динамичке изменске интеракције теорија је добар кандидат за опис временски зависног транспорта у случају слабе спреге између молекула и електрода.

У случају [2], коришћењем формализма Гринових функција у спрези са теоријом функционала густине аналитички се долази до општег израза за струјно-напонску карактеристику система молекула постављеног између две електроде у *Хартријевој апроксимацији у неортогоналном базису*. Основни израз за струју садржи линеарни развој по спољашњим временски зависним потенцијалима који се доводе на електроде и зависи од временски хомогених Гринових функција, временски хомогених сопствених енергија и Бутикових карактеристичних потенцијала. Карактеристични потенцијали задовољавају Линдхардову једначину. Решавањем Линдхардове једначине и коришћењем DFT-а, добиле би се све величине потребне за рачунање променљиве струје.

Израз за струју се добио тако што се полази од израза за декомпозицију јединице за случај добро локализованих неортогоналних орбитала у реалном простору. Прави се једночестични развој оператора поља по операторима креације/анихилације њихових дуалних стања. На основу добијеног развоја оператора поља, конструисане су Гринове функције на Келдишевој контури из чијих су се једначина кретања, након линеаризације, добиле нове везе између динамичких корекција временски хомогених Гринових функција и динамичког одговора система. Хамилтонијан је репрезентован у неортогоналном базису а Гринове функције у његовом дуалном базису. Кључан проблем у транспорту је везан за партиционисање система на добро дефинисане подсистеме. Таласна функција у изолованом систему (молекул) је локализована, али са смањивањем ширине баријера, што би одговарало процесу приближавања електрода, таласна функција „цури“ у електроде што доводи до тога да молекула више не може да се сматра изолованим објектом. Распростирање таласне функције молекула и у област електрода, доводи до преклапања између таласне функције молекула и стања у електродама, што омогућава тунелирање. Преклапање таласних функција води ка ненултим вредностима за антикомутационе релације између оператора креације/анихилације стања у електроди и

аниhilације/креације стања у молекулу. У ортогоналном опису антикомутатори између орбитала које припадају различитим подсистемима износе нула.

Дефиниција оператора броја честица је због неортогоналности неједнозначна, па је у раду узета Миликенова популациона анализа чиме се добија хермитски оператор броја честица. Добијени израз за временски променљиву струју садржи додатне чланове у односу на израз који би се добио коришћењем ортогоналног базиса. Ови чланови долазе од матрица преклапања између електрода и проширеног молекула као и од пројекције карактеристичних потенцијала на област њиховог споја. Без додатних чланова струја не би била гејџ инваријантна. Израз за кондуктансу, која се из развијене теорије добија у Томас-Ферми апроксимацији, нумерички је испитиван на систему два једнодимензионална ланца са два атома као молекулом у моделу јаке везе. За фреквенције близу нули, понашање система је резистивно и разлике између одговора у ортогоналном и неортогоналном случају нема. Са порастом фреквенције реална вредност резонантног максимума је све мања, а понашање система је индуктивно. Са друге стране, даље од резонантних стања кондуктанса почиње да расте са фреквенцијом. Ово иде у прилог томе да систем проводи индуктивно за енергије у близини резонанци а да је капацитивно провођење за енергије даље од резонанци могуће због опадања вредности имагинарног дела кондуктансе. Показано је да неортогоналност уводи асиметрични одговор и у реалном и у имагинарном делу кондуктансе у односу на минимум између два резонантна максимума. Неортогоналност у односу на ортогоналне орбитале даје мању јачину спреге између молекула и електрода што доводи до дужег време живота резонантних стања. На овај начин се може разумети механизам капацитивног прелаза који се види кроз негативан знак имагинарног дела кондуктансе у неортогоналном опису. Индуктивни прелаз се за високе фреквенције у оба случаја догађа због photon assisted tunneling-а када је видљив скок у вредности реалног дела кондуктансе. Индуктивно понашање за даљи пораст фреквенције је последица инерције електрона (време живота резонанци, тзв. dwell time, је дуже од периода временски звисне побуде) и немогућности електрона да моментално одговори на брзу промену напона.

ЕЛЕМЕНТИ ЗА КВАЛИТАТИВНУ АНАЛИЗУ

Квалитет научних резултата:

Током свог истраживачког рада Милош Дражић има публикован по један рад у врхунском међународном часопису **M21**, у истакнутом међународном часопису **M22**, као и по једно саопштење са међународног скупа штампано у целини **M33**, са међународног скупа штампаног у изводу **M34** и са скупа националног значаја штампаног у целини **M63**. Сви радови и саопштења су теоријски.

Радови у међународним часописима, International Journal of Quantum Chemistry (**M21**, **ИФ=2.920**) и Physica Status Solidi B (**M22**, **ИФ=1.605**), имају по три коаутора, а Милош Дражић је на оба рада први аутор.

Кандидат је учествовао/учествује у пројектима основних истраживања Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије:

- Динамика атомских, молекулских и мезоскопских система ОИ141029
- Електронске, транспортне и оптичке особине нанофазних материјала ОИ 171033

ЕЛЕМЕНТИ ЗА КВАНТИТАТИВНУ АНАЛИЗУ

Остварени резултати у периоду пре избора у научно звање:

Категорија	М бодова по раду	Број радова	Укупно М бодова
M21	8	1	8
M22	5	1	5
M33	1	1	1
M34	0,5	1	0,5
M63	1	1	1
M70	6	1	6

Поређење са минималним квантитативним условима за избор у звање научни сарадник:

Минималан број М бодова		Остварено
Укупно		16
M10+M20+M31+M32+M33+M41+M42		10
M11+M12+M21+M22+M23+M24		5

СПИСАК РАДОВА И САОПШТЕЊА

Радови у врхунским међународним часописима (M21):

M. S. Dražić, Viktor Z. Cerovski, Radomir Žikić, *Theory of time-dependent nonequilibrium transport through a single molecule in a nonorthogonal basis set*, International Journal of Quantum Chemistry **117** (2017) 57-73. **ИФ (2016) = 2.920**

Радови у истакнутим међународним часописима (M22):

M. S. Dražić, Viktor Z. Cerovski, and Radomir Žikić, *Non-equilibrium linear-response transport through quantum dot beyond time homogeneity at Hartree–Fock level*, Physica Status Solidi B **251** (2014) 1438–1450. **ИФ(2013) = 1.605**

Саопштења са међународних скупова штампана у целини (M33):

N. N. Nedeljković, Lj. D. Nedeljković, M. D. Majkić, and **M. S. Dražić**, *Neutralization in Quantum Teleology of the Ion-Surface Interaction*, Proc. 23rd Symposium on the Physics of Ionized Gases – SPIG 2006, Contributed Papers and Abstracts of Invited Lectures, Topical Invited Lectures and Progress Reports, August 28th- September 1st 2006, Kopaonik, Serbia, Ed. Nenad S. Simonović, Bratislav P. Marinković and Ljupčo Hadžijevski (Belgrade, Institute of Physics) Contributed Paper, pp. 171 – 174.
<http://www.phy.bg.ac.rs/~spig2006/Papers.htm#Section22>

Саопштења са међународних скупова штампана у изводу (M34):

Miloš S. Dražić, Ivana Đurišić, Viktor Z. Cerovski and Radomir Žikić, *The nonorthogonality effects on capacitive behaviour of quantum dot*, Serbian Ceramic Society Conference

ADVANCED CERAMICS AND APPLICATION V: Program and the Book of Abstracts, pp. 46.

Саопштења са скупа националног значаја штампаног у целини (M63):

М. С. Дражић, В. З. Церовски и Р. Жикић, *Теорија микроскопског неравнотежног временски нехомогеног транспорта кроз молекул у линеарном одзиву у Хатри-Фоковој апроксимацији*, XII Конгрес физичара Србије, 28. април- 2. Мај 2013, Врњачка бања, Србија

Зборник радова-Усмена предавања, предавања по секцијама, усмена и постер саопштења

Постер у секцији: 3. Физика кондензоване материје и статистичка физика стр. 268-271.

<http://www.dfs.rs/kongres/index.htm>; http://www.dfs.rs/kongres/Posteri_Kongres.pdf

Одбрањена докторска дисертација (M70):

„Теорија електронског транспорта кроз квантне тачке и молекуле“,

Милош Дражић, Физички факултет Универзитета у Београду (2017).



УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ
ФИЗИЧКИ ФАКУЛТЕТ

Бр. 277/9
12. 6 2017. год.
БЕОГРАД, СТУДЕНТСКИ ТРГ 12-18
П. ФАХ 44

На основу члана 161 Закона о општем управном поступку («Службени Лист СРЈ» број 33/97 и 31/01), и члана 120 Статута Универзитета у Београду - Физичког факултета, по захтеву МИЛОША ДРАЖИЋА, дипломираног физичара, издаје се следеће

У В Е Р Е Њ Е

МИЛОШ ДРАЖИЋ, дипломирани физичар, дана 12. јула 2017. године, одбранио је докторску дисертацију под називом

„ТЕОРИЈА ЕЛЕКТРОНСКОГ ТРАНСПОРТА КРОЗ КВАНТНЕ ТАЧКЕ И МОЛЕКУЛЕ“

пред Комисијом Универзитета у Београду - Физичког факултета, и тиме испунио све услове за промоцију у ДОКТОРА НАУКА – ФИЗИЧКЕ НАУКЕ.

Уверење се издаје на лични захтев, а служи ради регулисања права из радног односа и важи до промоције, односно добијања докторске дипломе.

Уверење је ослобођено плаћања таксе.



ДЕКАН ФИЗИЧКОГ ФАКУЛТЕТА

Проф. др Јаблан Дојчиловић