

НАУЧНОМ ВЕЋУ ИНСТИТУТА ЗА ФИЗИКУ У БЕОГРАДУ

На седници Научног већа Института за физику у Београду, одржаној 19. 09. 2017. године, именовани смо за чланове Комисије за избор др **Милоша Дражића** у звање научни сарадник. Након увида у достављени материјал, Научном већу подносимо следећи

ИЗВЕШТАЈ

1. Стручно-биографски подаци

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 је био стипендиста Министарства просвете, науке и технолошког развоја. 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 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.

2. Анализа научне активности

Област истраживања Милоша Дражића је физике кондензованог стања, а посебно област квантног електронског транспорта кроз наноструктуре и молекуле/квантне тачке. У раду користи методе аналитичког и нумеричког описа квантног транспорта кроз молекул који је постављен између две проводне електроде, користећи формализам Гринових функција дефинисаних на Келдишевој контури као и теорију функционала густине (DFT-density functional theory). Теоријске технике које кандидат користи у свом раду, део су формализма који који се користи при опису динамике многочестичних квантних система. Контурни (Кледишев формализам) обезбеђује да се пертурбативне технике, развијене за случај равнотежних система, успешно примене и на неравнотежне.

Тема досадашњег истраживања је испитивање утицаја временски променљивог напона мале амплитуде на транспортне особине произвољног молекула који је постављен између две добро проводне електроде. Поступак који се уводи јесте да се познати и ефикасни DFT

методи користе за рачунање временски хомогених Гринових функција као и стационарног потенцијала у молекулу.

2.1 Развој теорије временски зависне струје мале аплитуде у линеарној Хартри-Фоковој апроксимацији у формализму Гринових функција у спрези са DFT-ом у ортогоналној репрезентацији

Питање овог рада се односило на добијање израза за стационарну и временски зависну компоненту струје која протиче кроз квантну тачку постављену између добро проводних нано-електрода. То је урађено кроз одређивање динамичких корекција временски хомогених Гринових функција и стационарног потенцијала молекула у *Хартри-Фоковој апроксимацији у ортогоналном базису*. Динамички потенцијал, кроз самоусаглашену шему, имплицитно зависи од спољашњих потенцијала који представљају експериментално контролисану величину. Урачунавањем динамичког потенцијала квантне тачке као одговора на временски зависну побуду примењену на електроде, добијен је израз за струју који зависи само од разлике потенцијала, чиме је задовољен услов гејц инваријантности. При томе је урачунат и ефекат струје померања чиме је решен и проблем партиције струје. Показано је да једино у случају линеарне корекције динамички Фоков члан не уноси додатну грешку услед самоинтеракције, мимо оне коју практична употреба DFT-а производи. Уведена је саусаглашена схема којом се динамичке корекције добијају у функцији временски хомогених Гринових функција, стационарног потенцијала и временски зависних потенцијала у електродама.

Због урачунавања динамичке изменске интеракције теорија је добар кандидат за опис временски зависног транспорта у случају слабе спреге између молекула и електрода, где single charge ефекти, попут Кулонове блокаде, долазе до изражаја.

- **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.

2.2 Развој теорије временски зависне струје мале амплитуде у линеарној Хартријевој апроксимацији у формализму Гринових функција у спрези са DFT-ом у неортогоналној репрезентацији

Овај рад се односи на проблем одређивања израза за динамичку струју која је у линеарној вези са потенцијалима примењеним на електроде између којих је постављена квантна тачка. Притом је динамички одговор квантне тачке самоусаглашено одређиван у *Хартријевој апроксимацији (RPA) у неортогоналном базису*. DFT кодови, који су изворно направљени за рачунање једносмерне струје, 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 и био један од циљева истраживачког рада кандидата.

Искоришћена је Бутикерова схема развоја динамичког потенцијала квантне тачке по спољашњим потенцијалима примењеним на електроде. Показано је да је одређивање коефицијента у том развоју, тзв. Бутикерових карактеристичних потенцијала, довољно да би се уз помоћ DFT-а израчунале динамичке корекције Гринових функција и сопствених енергија неопходних за добијање динамичке струје. Изведен је израз за динамичку струју добијену у репрезентацији неортогоналних једночестичних добро локализованих орбитала, који су кориговани новим члановима којих у ортогоналном опису није било. Такође, показано је да је неходно урачунати пројекције динамичког одговора на област споја између квантне тачке и електрода. Без урачунатих пројекција гејд инваријантност струје би била нарушена. Аналитички и нумерички је демонстрирано да за вредности малих фреквенција и у DC лимиту нестаје ефекат нових чланова које неортогоналност уводи, али се динамичка кондуктанса система другачије понаша у ортогоналном и неортогоналном опису како фреквенција почиње да расте.

Радећи у неортогоналном базису добијен је израз за динамичку струју који директно може да користи резултате које даје стационарна (DFT) транспортна теорија, будући да је избегнуто коришћење ортогонализационих схема. Ово чини развијену теорију комјутационо погоднијом у односу на постојеће теорије временски зависног транспорта кроз наноструктуре.

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

Важење развијених теорија је ограничено на фреквенције временски зависних потенцијала које 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 применљивости теорија око 1200THz (250nm). Доња граница применљивости је одређена линеарношћу теорије и задата је неједнакошћу $eV/hv < 1$ (за амплитуду напона од око 0,1mV, доња граница је око 20GHz).

3. Елементи за квантитативну анализу рада кандидата

Остварени М-бодови по категоријама:

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	21,5
M10+M20+M31+M32+M33+M41+M42	10	14
M11+M12+M21+M22+M23	6	13

4. Елементи за квалитативну анализу рада кандидата

4.1 Организација научног рада

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 ОИ171033

4.2 Квалитет научних резултата

Научни ниво и значај резултата

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

Параметри квалитета часописа

У категорији **M21** кандидат је објавио:

1 рад у часопису International Journal of Quantum Chemistry (**ИФ=2,920**).

У категорији **M22** кандидат је објавио:

1 рад у часопису Physica Status Solidi B (**ИФ=1,605**).

Укупан импакт фактор радова кандидата у часописима категорије **M21** и **M22** је **4,525**.

4.3 Нормирање броја коауторских радова:

Радови кандидата су теоријски. Како радови имају по 3 коаутора, сваки рад се рачуна са пуном тежином.

4.4 Конкретан научни допринос кандидата у реализацији резултата у научним центрима у земљи и иностранству

Милош Дражић је своје истраживачке активности реализовао у Институту за физику у Београду. Посебно истичемо да је у радовима који су објављени у међународним часописима, а који имају по три коаутора, Милош Дражић први аутор.

Кандидат је показао самосталност у раду будући да је урадио све прорачуне, добио и интерпретирао резултате, написао радове и био у комуникацији са уредницима и рецензентима.

МИШЉЕЊЕ И ПРЕДЛОГ

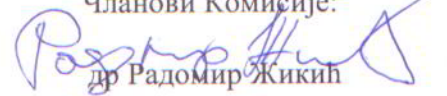
Имајући у виду досадашњи рад и резултате др Милоша Дражића сматрамо да кандидат испуњава услове Правилника о поступку, начину вредновања и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата истраживача, Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије за избор у звање научни сарадник

ПРЕДЛАЖЕМО

да Научно веће Института за физику у Београду подржи избор др Милоша Дражића у звање **НАУЧНИ САРАДНИК**.

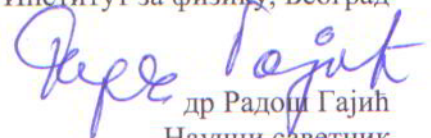
У Београду,
20. 09. 2017. године

Чланови Комисије:


др Радомир Жикић

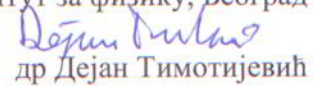
Научни саветник

Институт за физику, Београд


др Радош Гајић

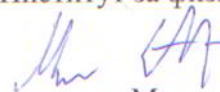
Научни саветник

Институт за физику, Београд


др Дејан Тимотијевић

Научни саветник

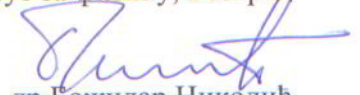
Институт за физику, Београд



др Марко Спасеновић

Виши научни сарадник

Институт за физику, Београд



др Божидар Николић

Доцент

Физички факултет, Универзитет у Београду