

## Научном већу Института за физику у Београду

### Извештај комисије за избор др Јакше Вучичевића у звање виши научни сарадник

На седници Научног већа Института за физику у Београду одржаној 29. 9. 2020. године именовани смо у комисију за избор др Јакше Вучичевића у звање виши 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.

#### 1. Биографски подаци о кандидату

Јакша Вучичевић је рођен 30. маја 1984. године у Београду. Матурирао је 2003. године у Деветој гимназији. Дипломирао је 2009. године на Физичком факултету Универзитета у Београду, смер Примењена физика и информатика. Основне студије је завршио са просеком 9.05. Дипломски рад "Утицај асиметрије густине стања на особине Мотовог метал-изолатор прелаза" је урадио под менторством др Дарка Танасковића, са Института за физику у Београду. У периоду 2009-2015. год. је био студент докторских студија на Физичком факултету Универзитета у Београду, смер Физика кондензоване материје и статистичка физика. Докторску тезу "Показатељи скривене квантне критичности у високо-температурном транспорту наелектрисања у близини Мотовог прелаза" је урадио под руководством др Дарка Танасковића. Добитник је годишње студентске награде Института за физику у Београду 2016. год., за најбољу докторску тезу у претходној години. Јакша је запослен на Институту за физику у Београду од 2010. године где ради у оквиру Лабораторије за примену рачунара у науци у оквиру Националног центра изузетних вредности за изучавање комплексних система.

Након докторирања, Јакша Вучичевић је провео две године (2015-2017) као постдок у групи др Оливијеа Парколеа на институту IphT (Институт за теоријску физику), СЕА (Комесаријат за атомску енергију и алтернативне изворе енергије) Saclay, Париз, Француска, где је радио у блиској сарадњи са групом др Антоана Жоржа са College de France, такође у Паризу. Био је учесник пројекта "Quantitative approaches for strongly correlated quantum systems in equilibrium and far from equilibrium", *European Research Council (ERC) starting grant* (руководилац Оливије Парколе). У периоду од 2016 до 2017 године учествовао је и на билатералном пројекту Србије и Републике Словеније "Јаке електронске корелације и суперпроводност" којим су руководили Д. Танасковић и Р. Житко.

Након повратка из Француске, 2017. Јакша Вучичевић је наставио рад на Институту за физику у Београду. Тренутно је руководио српске стране билатералног пројекта са републиком Немачком (DAAD) "Електронске корелације у оксидима са трансфером наелектрисања: функције одзива и дугодометна уређења" за период 2020-2021. године., у сарадњи са др Филипом Хансманом (Friedrich Alexander Universität Erlangen/Nürnberg). Јакша такође учествује и у пројекту NI4OS-Europe (National Initiatives for Open Science in Europe, Grant number 857645), финансираном од стране Европске комисије у оквиру програма Хоризонт 2020. На овом пројекту др Вучичевић ради на пројектном задатку под називом: LMDB, Distributed database of numerical results and codes pertaining to a large class of condensed matter theoretical models. Од августа 2020. Јакша је руководио двогодишњег ПРОМИС пројекта Фонда за науку под називом "Хладни атоми, Хабардов модел и холографија: кључ за чудне метале".

Главна тема рада др Јакше Вучичевића су ефекти јаких електронских корелација у физици кондензоване материје. У досадашњем раду, Јакша се бавио феноменима као што су Мотов метал-изолатор прелаз и неконвенционална суперпроводност. Током боравка у Француској Јакша се додатно специјализовао за развој нумеричких алгоритама за решење Хабардовог модела што му је од тада и централна линија рада. Јакша Вучичевић је објавио 13 публикација у међународним часописима (4 рада категорије M21a, 8 радова категорије M21, и 1 рад категорије M23). На основу базе SCOPUS, радови су цитирани 190 пута (172 не рачунајући ауто-цитате), са h-фактором 8. Јакша има активну сарадњу са групама из Љубљане, Париза, Њујорка и Ерлангена. Јакша је био ментор једног студента на мастер студијама Физичког факултета у Београду и има сарадњу са истраживачком станицом Петница. Јакша Вучичевић је веома активан рецензент часописа Physical Review (Letters, B и E) са укупно 34 рецензије од октобра 2017. год.

## **2. Преглед научне активности**

Научно-истраживачки рад кандидата се може поделити у 3 дела:

1. Истраживање особина транспорта наелектрисања у околини Мотовог метал-изолатор прелаза;
2. Истраживање неконвенционалне суперпроводности;
3. Развој нумеричких метода за решење вишечестичног квантног проблема фермиона на решетки.

### **2.1. Транспорт у околини Мотовог метал-изолатор прелаза**

Мотов метал-изолатор прелаз је појава у системима чврстог стања где се отпорност система промени нагло и драстично при малој промени неког спољног параметра (притисак, температура или хемијски састав). Ова појава се опажа у низу материјала

као што су разни оксиди ванадијума и капа-органски системи, а верује се да је релевантна и за купратне високотемпературне суперпроводнике. Представља последицу ефективно јаке кулонове интеракције између електрона у попупопуњеној валентној зони материјала. Први теоријски опис метал-изолатор прелаза је постигнут почетком 90-их, у оквиру решења Хабардовог модела помоћу теорије динамичког средњег поља (DMFT).

### Квантно-критично скалирање

Током докторских студија, Јакша Вучичевић се фокусирао на прорачун отпорности у Хабардовом моделу, управо у околини Мотовог прелаза. У овој линији рада, Јакша Вучичевић и Дарко Танасковић су имали блиску сарадњу са групом др Владимира Добросављевића са Државног универзитета на Флориди, САД. У три публикације које су објавили у периоду 2011-2015. године, показано је да се отпорност на високим температурама понаша у складу са једноставним законом скалирања. Ово понашање наликује законима скалирања који важе у околини квантних критичних тачака (квантно-критично скалирање) у низу претходно добро изучених појава, укључујући и метал-изолатор прелаз у дводимензионом електронском гасу (нпр. оствареном на граници два полупроводника). Показано је да скалирање опстаје у широком делу фазног дијаграма Хабардовог модела, у околини оба типа Мотовог прелаза који се у том моделу опажа (прелаз услед јачине интеракције, и прелаз услед допирања). Ово понашање је подробно испитано и дати су аргументи да је то вид универзалног понашања везаног за сам фазни прелаз, које би се требало видети у експерименту независно од детаља структуре једињења.

Резултати ове линије рада су потврђени експериментално од стране групе К. Каноде из Јапана, што је објављено 2015. године у часопису Nature Physics. Они су извршили систематска мерења отпорности у неколико капа-органских материјала који испољавају Мотов прелаз и сматра се да су добро описани Хабардовим моделом. Заиста, независно од детаља структуре хемијског једињења, опсервирани су на високој температури квантно критично скалирање отпорности у складу са DMFT прорачунима приказаним у публикацијама кандидата.

Од нарочитог значаја је и што је установљено да су резултати прорачуна за Хабардов модел у складу са експерименталним опсервацијама у купратним једињењима у режиму лошег, тј. чудног метала. То је режим за који се сматра да је од изузетног значаја за разумевање високотемпературне суперпроводности у купратним једињењима. Овај режим карактерише линеарна зависност отпорности од температуре, за шта недостаје дубље разумевање. Анализа учињена у раду кандидата је повезала нагиб линеарне отпорности са фундаменталним критичним експонентима Мотовог прелаза, што је резултовало публикацијом у врхунском часопису Physical Review Letters, чији је Јакша Вучичевић први аутор.

У овој линији рада, Јакша је допринио имплементацијом нумеричких метода (DMFT и рачунање проводности), продукцијом и анализом резултата, као и писањем публикација.

Публикације кандидата из ове линије рада су:

1. **J. Vučićević**, D. Tanasković, M. Rozenberg, V. Dobrosavljević, "Bad-metal behavior reveals Mott quantum criticality in doped Hubbard models"  
Phys. Rev. Lett. 114, 246402 (2015)
2. **J. Vučićević**, H. Terletska, D. Tanasković, V. Dobrosavljević, "Finite temperature crossovers and the quantum Widom line near the Mott transition"  
Phys. Rev. B 88, 075143 (2013)
3. H. Terletska, **J. Vučićević**, D. Tanasković, V. Dobrosavljević, "Quantum Critical Transport Near the Mott Transition "  
Phys. Rev. Lett. 107, 026401 (2011)

### Неуређеност и јаке интеракције

Од раније је познато да неуређеност у материјалима негативно утиче на њихову проводност, и да јака неуређеност може довести до локализације електрона, што је фаза позната као Андерсонов изолатор. Међутим није било у потпуности разјашњено на који начин се ово понашање модификује у присуству јаких интеракција између електрона.

На изучавању неуређеног Хабардовог модела, кандидат је радио у сарадњи са др Дарком Танасковићем, и групама др Владимира Добросављевића и др Марије Каролине О. Агуиар (Бело Хоризонте, Бразил). У раду објављеном 2015. год., испитан је одговарајући фазни дијаграм. Испоставља се да се ефекти јаких интеракција и неуређености међусобно поништавају, и да је систем најметалнији када су енергијске скале неуређености и интеракција блиске. При великим интеракцијама и великој неуређености, описана је и мешана фаза Мотовог и Андерсоновог изолатора.

У овој линији рада, кандидат је развио сет C++ кодова који имплементирају метод типичног медијума (ТМТ) за решење неуређеног Хабардовог модела. Кодови које је развио кандидат су и даље у употреби, што се наводи и у захвалници скорашњег препринта arXiv:2008.09714.

Рад кандидата из ове линије рада је:

1. H. Braganca, M. C. O. Aguiar, **J. Vučićević**, D. Tanasković, V. Dobrosavljević, "Anderson localization effects near the Mott metal-insulator transition"  
Phys. Rev. B 92, 125143 (2015)

### Отпорност у две димензије и вертекс корекције

У оквиру DMFT теорије, проводност за Хабардов модел се може израчунати без додатних апроксимација. Међутим, у случају дводимензионалне решетке (квадратна, троугаона), DMFT је само приближан метод, а са систематским поправкама DMFT-а, настаје и потреба за корекцијама израза за проводност (такозване "вертекс" корекције).

Међутим, урачунавање вертекс корекција у отпорности за Хабардов модел представља вишедеценијски изазов, и досадашњи покушаји нису дали дефинитиван одговор на питање величине ових корекција. На основу физичарске интуиције, даване су различите процене, а често се сматрало да су вертекс корекције занемариве на високој температури где је сопствена енергија електрона локална.

У периоду 2017-2020. год. кандидат је сарађивао са др Дарком Танасковићем, групом из Института Јожеф Стефан из Љубљане као и др Нилсом Венцелом (Flatiron Institute, Њујорк, САД) на проблему одређивања доприноса вертекс корекција у случају дводимензионалне решетке. Поређењем резултата неколико најмодернијих нумеричких метода успешно су рашчлањени различити доприноси оптичкој проводности. Установљено је да незанемарљиве вертекс корекције опстају и до највиших температура, док неки други ефекти као што су коначност решетке и нелокалне корелације играју секундарну улогу. На тај начин, показано је да је резултат прорачуна егзактном дијагонализацијом на решетки величине  $4 \times 4$  (FTLM) практично егзактан резултат за Хабардов модел у термодинамичком лимиту и температурама већим од око десетог дела ширине енергетске зоне.

Овај резултат је нарочито значајан у светлу скорашњих експеримената са хладним атомима у оптичким решеткама, који симулирају Хабардов модел. У експерименту објављеном у часопису Science (P. T. Brown et al., Science 363, 379 (2019)) поређена је измерена отпорност са DMFT и FTLM теоријама и закључено је да се две теорије не слажу, и да се резултат мерења слаже боље са FTLM теоријом. Међутим, остало је неразјашњено која од две теорије је ближа егзактном резултату, и одакле потиче разлика између тих теорија. У раду кандидата, ово питање је сада разјашњено, што је од изузетне важности за успостављање провере будућих експеримената на хладним атомима.

У најскоријем раду кандидата, систематски прорачуни из ове линије рада су проширени и на случај троугаоне решетке. Документовано је да је сопствена енергија електрона на троугаоној решетки локалнија него на квадратној, и потврђена је физичка интуиција да је то индикатор мањег значаја вертекс корекција за отпорност, иако су оне квантитативно незанемарљиве и у случају троугаоне решетке. Показано је и да, неочекивано, на троугаониј решетки термодинамичке величине спорије конвергирају при повећању величине решетке. Ови резултати имају важне импликације везано за избор нумеричких метода и теоријске студије у будућности.

У овој линији рада, Јакша Вучичевић је допринео имплементацијом неколико најмодернијих нумеричких метода (CDMFT, DCA, CTINT), као и анализом резултата и писањем публикација.

Ова линија рада је до сада резултовала са две публикације:

1. A. Vranić, **J. Vučićević**, J. Kokalj, J. Skolimowski, R. Žitko, J. Mravlje, D. Tanasković, "Charge transport in the Hubbard model at high temperatures: triangular versus square lattice" Phys. Rev. B **102**, 115142 (2020)

2. **Jaksa Vučićević**, Jure Kokalj, Rok Žitko, Nils Wentzell, Darko Tanasković, Jernej Mravlje, "Conductivity in the square lattice Hubbard model at high temperatures: importance of vertex corrections"

Phys. Rev. Lett. 123, 036601 (2019)

## 2.2. Неконвенционална суперпроводност

### Суперпроводност у двослоју графена

Графен је последњих година привлачио пуно пажње као систем са многим изузетним својствима, и великим бројем могућности за потенцијалне примене. Једна од важних и недовољно истражених питања је могућност остварења неконвенционалне суперпроводности у оваквим системима, нарочито у случају двослоја графена где постоји ненулта густина стања на Ферми нивоу.

У периоду 2011-2012. год. кандидат је сарађивао са др Милицом Миловановић (Институт за физику у Београду) и Марком Гербигом (LPS, Лабораторија за физику чврстог стања, Универзитет Париз - југ, Orsay, Француска) на истраживању суперпроводне нестабилности у двослоју графена, услед ефективних антиферо-магнетих интеракција. Показано је да такве нестабилности постоје, али да функција спаривања значајно зависи од попуњености енергетске зоне. Нађено је да је спаривање мешаног типа, али да је доминантно типа  $d+id$ , и да опстаје првенствено на умереном допирању.

Кандидат је у овој линији рада допринео имплементацијом решења једначина средњег поља, продукцијом и анализом резултата и писањем публикације.

Публикација кандидата у овој линији рада је:

1. **J. Vučićević**, M. O. Goerbig, M. V. Milovanovic, "d-wave superconductivity on the honeycomb bilayer"

Phys. Rev. B 86, 214505 (2012)

### Суперпроводност у Хабардовом моделу

Многи сматрају да је Хабардов модел на квадратној решетки минимални модел за опис високотемпературне суперпроводности у купратним једнићењима. У Хабардовом моделу, узрок суперпроводности је одбојна Кулонова интеракција. Као и у купратима, спаривање је  $d$ -типа, што значи да се спарују електрони на различитим чворовима решетке. Третирање овакве суперпроводности је изузетан изазов за теорију јер захтева рад у вишечестичном формализму и опис нелокалних корелација; то значи да се не могу користити теорије средњег поља као што је BCS теорија, али ни DMFT теорија у оригиналној формулацији. Минималном теоријом суперпроводности у Хабардовом моделу се последњих деценија сматрала кластер DMFT теорија, која захтева велике рачунарске ресурсе, а може описати само кратकोдометно спаривање електрона.

У раду кандидата у оквиру групе др Оливијеа Парколеа током 2016-2017. године, развијен је TRILEX метод за третирање суперпроводности  $d$ -типа у Хабардовом моделу.

Овај метод је сличан оригиналној DMFT теорији по рачунској захтевности, али омогућава опис и дугодометног спаривања. Разрађена су и систематска поједностављења ове теорије која се могу користити у режиму слабије интеракције. Теорија је искоришћена да се испита фазни дијаграм Хабардовога модела и добијени су резултати у складу са другим методима и општом феноменологијом купрата. Додатно, испитане су спектралне особине у суперпроводној фази упоредо са "pseudogap" фазом и опажена је изузетна сличност између те две фазе. Такође, систематски је испитана висина критичне температуре за суперпроводност у функцији константи прескока решетке и пронађен је један конкретан избор параметара за коју је висина критичне температуре нарочито висока, у режиму како слабих тако и јаких интеракција.

У овој линији рада, кандидат је допринео извођењем TRILEX једначина у Намбу формализму, имплементацијом методе, продукцијом и анализом резултата као и писањем публикације.

Публикација кандидата из ове линије рада је:

1. **Jakša Vučićević**, Thomas Ayrar, Olivier Parcollet, "TRILEX and GW+EDMFT approach to  $d$ -wave superconductivity in the Hubbard model" Phys. Rev. B 96, 104504 (2017)

#### Суперпроводни сценарио платоа $5/2$ у фракционом квантном Холовом ефекту

Током 2018. године, кандидат је сарађивао са др Милицом Миловановић на истраживању могућих основних стања електронског гаса у јаком магнетном пољу које одговара фактору попуњености  $5/2$  у фракционом квантном Холовом ефекту. Основно стање у том случају се очекује да садржи спаривање електрона истог спина,  $p$  типа. У оквиру апроксимације једног Ландау нивоа са масеним чланом који нарушава честица-шупљина симетрију и на тај начин описује ефекат присуства осталих Ландау нивоа, показано је да основно стање заиста има нестабилност ка спаривању. Описане су нестабилности ка три врсте спаривања, које одговарају вишечестичним стањима честица-шупљина-симетричном Пфафијану, као и Пфафијану и анти-Пфафијану који су међусобно симетрични до на предзнак масеног члана. Налази ове поједностављене теорије су у складу са софистицираним нумеричким симулацијама из литературе.

Кандидат је у овој линији рада допринео имплементацијом самоусаглашене једначине средњег поља, продукцијом нумеричких резултата и писањем одговарајућег дела публикација.

Публикације кандидата из ове линије рада су:

1. L. Antoniћ, **J. Vučićević**, M. V. Milovanović, "Paired states at  $5/2$ : PH Pfaffian and particle-hole symmetry breaking" Phys. Rev. B 98, 115107 (2018)

2. M.V. Milovanović, S. Djurdjević, **J. Vučićević**, L. Antičić, "Pfaffian paired states for half-integer fractional quantum Hall effect"  
Modern Physics Letters B 34, 2030004 (2020)

### 2.3. Нумеричке методе за решење система интерагујућих фермиона на решетки

Проблем интерагујућих фермиона на решетки је један од најтежих у теоријској физици. У основи проблема је експоненцијално растући простор стања квантних вишечестичних система са величином тих система. Директна решења методима егзактне дијагонализације Хамилтонијана су ограничена на мале системе до око 16 чворова решетки. То није задовољавајуће за разматрања на ниској температури и у присуству средње- или дуго-дометних корелација. Решење се обично тражи помоћу метода заснованих на Монте Карло сумирању бесконачних редова који су добијени развојем партиционе функције или опсервабли од интереса. Овакве методе могу бити јако моћне, али се и често наилази на непремостив проблем "фермионског знака" (проблем осцилаторних подинтегралних функција). Чак и када га је могуће превазићи, преостаје и проблем аналитичког продужења које уноси неконтролисану систематску грешку у резултате за динамичке (тј. фреквентно зависне) опсервабле. Последњих деценија у току је изузетан напор физичарске заједнице да се формулишу методи базирани на Монте Карло сумирању који су и контролисани и заобилазе проблеме знака и аналитичког продужења.

#### *Рубтсов Монте Карло (СТИИТ), TRILEX и метод угњеждених кластера*

Један од најуспешнијих Монте Карло приступа решењу модела решетки је Рубтсов алгоритам (СТИИТ). Међутим, као и други слични алгоритми, решење постаје рачунски неизводиво за велике решетки, на ниској температури, и у одсуству честица-шупљина симетрије. Иако је оваквим приступом могуће третирати веће решетки него егзактном дијагонализацијом, и даље остају присутни ефекти коначности решетки који су непожељни. Један систематски приступ је да се коначна решетка решава у присуству некаквог самоусаглашеног медијума који уноси у систем ефекте остатка бесконачне решетки (приступ "уроњеног кластера", quantum embedding, QE). Самоусаглашеност медијума се може остварити на различите начине, па на основу тога разликујемо неколико различитих QE метода (у том смислу, DMFT се може сматрати најједноставнијим QE методом).

Током постдокторског усавршавања 2015-2017. године у групи др Оливијеа Парколеа, кандидат је радио на развоју и имплементацији TRILEX методе за решење Хабардовога модела. TRILEX метода је по духу слична DMFT методи, али иде корак даље у комплексности објекта који се апроксимира рачуном на коначној решетки. Док се у DMFT приступу и његовим директним генерализацијама апроксимира сопствена енергија електрона, у TRILEX методу се апроксимира иредуцибилни електрон-бозон вертекс, тј. фреквентно и просторно зависна амплитуда расејања електрона о флукуације густине наелектрисања и спина. Ово омогућава да се заобиђе ограничење DMFT методе и њених уопштења у којима је сопствена-енергија или локална или кратководомента величина или, пак, величина дисконтинуална у импулсном простору. У



TRILEX методу, сопствена енергија може бити произвољног димензиона, и континуална је у импулсном простору. Ово долази по цени потребе да уроњени кластер садржи временски зависне интеракције. За ово је било потребно уопштити Рубтсов алгоритам који се користи за решење уроњеног кластера.

Током 2015-2016. год., кандидат је уопштио једначине Рубтсов алгоритма на случај временски зависних интеракција, формулисао неколико додатних унапређења везаних за ефикасност прорачуна и имплементирао одговарајуће измене у постојећој C++ имплементацији СТИНТ. Програмски код на коме је кандидат радио је део TRIQS библиотекe који се и данас активно користи и цитира се у многим публикацијама. Од 2017. рад на том коду је преузео Нилс Венцел са Flatiron института у Њујорку.

Као што је већ поменуто под ставком 2.2., кандидат је током 2016-2017. развио и уопштење TRILEX метода у Намбу простору што омогућава третман супрпроводности у Хабардовом моделу.

Такође у периоду 2016-2017. године, кандидат је развио дуго чекано уопштење метода угњеждених кластера (NCS). NCS је оригинално формулисан још давне 1995. године (A. Schiller and K. Ingersent, Phys. Rev. Lett. **75**, 113 (1995)) и прво је уопштење DMFT метода за дводоимензионалне решетке. Осовна идеја NCS је да се уместо једно уроњеног кластера решава више њих самоусаглашено, и да се сопствена-енергија реконструише линеарном комбинацијом вредности добијених у тим кластерима тако да се сваки дијаграм урачуна тачно једном. На тај начин избегавају се проблеми других уопштења DMFT која укључују или вештачко нарушење трансляторне симетрије, или дисконтинуалност сопствене енергије у импулсном простору. Оригинално, метод је формулисан само за кластере величине 2 чвора, а пуно уопштење на кластере произвољне величине и облика није било могуће. Уз помоћ алгоритама симболичке алгебре, кандидат је успео да формулише општи NCS метод, за кластере произвољне величине и облика. Метод је имплементирао и подробно тестирао у поређењу са преосталим QE методима. Резултати ове велике систематске студије су открили суштинско ограничење метода који се заснивају на апроксимацијама Латинџер-Ворд функционала слободне енергије. Овај недостатак NCS теорије се испољава у режиму јаких интеракција, и у сличном облику је тада први пут примећен и у другим методима, првенствено методу DCA+. Ово је мотивисало даљи рад, и довело до публикације Phys. Rev. B **101**, 195114 (2020) где су потврђени налази рада кандидата и предложена одговарајућа унапређења методе DCA+.

Рад кандидата на развоју СТИНТ и QE метода се може сматрати важним помаком у методологији и важном основом за даљи развој у изузетно активној области, што потврђују и цитати у скорашњем прегледном раду Rev. Mod. Phys. **90** 025003 (2018).

Публикације кандидата из ове линије рада су:

1. **Jakša Vučićević**, Nils Wentzell, Michel Ferrero, Olivier Parcollet, "Practical consequences of Luttinger-Ward functional multivaluedness for cluster DMFT methods" Phys. Rev. B **97**, 125141 (2018)

2. Thomas Ayrал, **Jakša Vučićević**, Olivier Parcollet, "The Fierz convergence criterion: a controlled approach to strongly-interacting systems with small embedded clusters" Phys. Rev. Lett. 119, 166401 (2017)

3. **Jakša Vučićević**, Thomas Ayrал, Olivier Parcollet, "TRILEX and GW+EDMFT approach to *d*-wave superconductivity in the Hubbard model" Phys. Rev. B 96, 104504 (2017)

### Дијаграматски Монте Карло у домену реалне фреквенције

Дијаграматски Монте Карло методи су класа алгоритама у којима се врши прорачун појединачних Фајнманових дијаграма у интеракционом развоје неке физичке величине. Овај метод има предност да се може директно третирати термодинамички лимит, али је ограничен на релативно ниске вредности константе интеракције. Ипак, од скора је показано да се овај метод може одговарајуће уопштити тако да омогући приступ и режиму јачих интеракција, као и већу ефикасност. Ово је довело да обновљеног интересовања за дијаграматски Монте Карло. Међутим, као и у свим методима у Маџубара формализму, остаје проблем аналитичког продужења.

Од 2018. год. кандидат се бави формулацијом дијаграматског Монте Карла у домену реалне фреквенције, што омогућава да се избегне потреба за аналитичким продужењем. Могућност да се оваква реформулација постигне је препозната независно и првобитно објављена у публикацији групе др Џејмса Леблана (Њуфаундленд, Канада) 2018. год. У сарадњи са др Мишел Ферером (College de France, Париз), кандидат је развио прву имплементацију дијаграматског Монте Карла у домену реалне фреквенце, што је вероватно први потпуно контролисани прорачун спектралне функције у Хабардовом моделу у нетривијалном режиму параметара и близу термодинамичког лимита.

Основа за овај рад је алгоритам симболичке алгебре који егзактно решава вишеструке интерне суме по Маџубара фреквенцијама које фигуришу у доприносима сваког појединачног дијаграма. Решења аналитичког дела су често изрази који у меморији рачунара заузимају читаве мегабајте, а њихова нумеричка евалуација представља велики изазов и захтева употребу низа напредних алгоритамских и програмерских техника, везано за тачност и ефикасност.

У последњих годину дана, кандидат је додатно уопштио и унапредио овај метод, употребом раније непознатог аналитичког решења вишеструких интеграла по имагинарном времену који фигуришу у одговарајуће формулисаним Фајнмановим дијаграмима (публикација је у припреми).

Публикација кандидата из ове линије рада је:

1. **Jakša Vučićević**, Michel Ferrero, "Real-frequency Diagrammatic Monte Carlo at Finite Temperature" Phys. Rev. B 101, 075113 (2020)

### 3. Елементи за квалитативну анализу рада

#### 3.1 Квалитет научних резултата

##### 3.1.1 Научни ниво и значај резултата, утицај научних радова

Др Јакша Вучичевић је у свом досадашњем раду објавио 13 радова у међународним часописима са ISI листе, од којих 4 у категорији M21a, 8 у категорији M21, и 1 у категорији M23. У периоду након одлуке Научног већа о предлогу за стицање претходног научног звања, др Јакша Вучичевић је објавио 9 радова у међународним часописима са ISI листе од којих 2 у категорији M21a, 6 у категорији M21 и 1 у категорији M23. Као пет најзначајнијих радова кандидата могу се узети (број цитата на основу базе Scopus):

1. **J. Vučićević** and M. Ferrero, "Real-frequency diagrammatic Monte Carlo at finite temperature", Phys. Rev. B 101, 075113 (2020)

M21, ИФ=3.736, цитиран 2 пута

2. **J. Vučićević**, J. Kokalj, R. Žitko, N. Wentzell, D. Tanasković, J. Mravlje, "Conductivity in the Square Lattice Hubbard Model at High Temperatures: Importance of Vertex Corrections", Phys. Rev. Lett. 123, 036601 (2019)

M21a, ИФ=9.227, цитиран 5 пута

3. **J. Vučićević**, N. Wentzell, M. Ferrero, and O. Parcollet, "Practical consequences of the Luttinger-Ward functional multivaluedness for cluster DMFT methods", Phys. Rev. B 97, 125141 (2018)

M21, ИФ=3.736, цитиран 14 пута

4. **J. Vučićević**, D. Tanasković, M. J. Rozenberg, and V. Dobrosavljević, "Bad-Metal Behavior Reveals Mott Quantum Criticality in Doped Hubbard Models", Phys. Rev. Lett. 114, 246402 (2015)

M21a, ИФ=7.728, цитиран 35 пута

5. Н. Terletska, **J. Vučićević**, D. Tanasković, and V. Dobrosavljević, "Quantum Critical Transport near the Mott Transition", Phys. Rev. Lett. 107, 026401 (2011)

M21a, ИФ=7.662, цитиран 54 пута

Радови 4 и 5 су били део докторске дисертације кандидата. У раду 5 је уведен појам квантне критичности Мотовог прелаза и успостављено квантно критично скалирање вредности отпора на високим температурама у оквиру DMFT теорије за полупопуњени Хабардов модел. Налази теорије су потврђени након тога у експериментима на капа-органским системима, а концепт квантне критичности Мотовог прелаза је преузет и испитиван у низу теоријских радова, што потврђује висока цитираност рада. Рад 4 је

уопштење теорије из рада 5 на случај допираног Хабардовог модела, где је показано слагање са мерењима на чувеном високотемпературном суперпроводнику LSCO.

Рад 3 је написан током боравка кандидата на постдокторском усавршавању у Француској. Теорија представљена у том раду је више од две деценије чекано уопштење метода угњеждених кластера на кластере произвољног облика и величине. У раду је представљено и систематско поређење постојећих метода за решење Хабардовог модела, што ће користити као основа за даљи развој теоријских апроксимација. У раду је откривен инхерентни недостатак Латинџер-Ворд функционала као основе за контролисане апроксимације са задовољеним законима одржања, махом коришћене већ 50 година. Конкретно, показан је недостатак теорије DCA+, што је накнадно потврђено, и што је довело до нових предлога за унапређење теорије.

У раду 2 установљено је нумерички егзактно решење за проводност Хабардовог модела на високим температурама. Ово је изузетно важно за интерпретацију скорашњег експеримента на хладним атомима у оптичкој решетки (P. T. Brown et. al., Science 363, 379 (2019)). Такође, у раду је дат одговор на вишедеценијско питање важности вертекс корекција за проводност Хабардовог модела у две димензије. Очекује се да ће методологија и подробна анализа резултата које су приказане у раду имати важан утицај на будућа теоријска испитивања.

У раду 1 развијен је први дијаграматски Монте Карло метод на бази Мацубара формализма, који не захтева аналитичко продужење и даје потпуно контролисан резултат за спектралне особине (и потенцијално друге динамичке опсервабле). Ово је значајан методолошки искорак који се очекује да ће у будућности омогућити боље разумевање спектралних особина купрата, као и самог Хабард модела и његових експерименталних реализација у експериментима са хладним атомима у оптичкој решетки.

### **3.1.2 Позитивна цитираност научних радова кандидата**

Према бази података Scopus (Web of Science) на дан 16. 9. 2020. године, радови кандидата су цитирани укупно 190 (181) пут, односно 172 (164) пута не рачунајући самоцитате. Према обе базе Хиршов индекс кандидата је 8. Треба рећи да је значајан број цитата забележен у најпрестижнијим часописима као што су Reviews of Modern Physics, Science, Nature Physics, Nature Materials, Nature Photonics, Reports on Progress in Physics и Physical Review Letters.

### **3.1.3 Параметри квалитета часописа**

У категоријама M21a, M21 и M23 кандидат је објавио радове у следећим часописима, при чему су подвучени бројеви односе на радове објављене након одлуке Научног већа о предлогу за стицање претходног научног звања:

- 4 рада (2+2) у часопису *Physical Review Letters* (категорија M21a) (ИФ: 1 рад 7.622, 1 рад 7.728, 1 рад 8.839, 1 рад 9.227)
- 8 (6+2) радова у часопису *Physical Review B* (категорија M21) (ИФ: 1 рад 3.774, 1 рад 3.767, 3 рада 3.736, 3 рада 3.836)
- 1 рад (1+0) у часопису *Modern Physics Letters B* (категорија M23) (ИФ: 1.224)

Укупан импакт фактор радова кандидата је 64,897, а у периоду након одлуке Научног већа о предлогу за стицање претходног научног звања тај фактор је 42.006.

Треба посебно напоменути да су 4 рада објављена у часопису *Physical Review Letters* што је часопис са највећим угледом и традицијом у физици.

Додатни библиометријски показатељи у вези са објављеним радовима кандидата након одлуке Научног већа о предлогу за стицање претходног научног звања дати су у доњој табели. Она садржи импакт факторе (ИФ) радова, М бодове радова по српској категоризацији научноистраживачких резултата, као и импакт фактор нормализован по области (СНИП). У табели су дате укупне вредности, као и вредности свих фактора усредњених по броју чланака и по броју аутора по чланку, за радове објављене у категоријама

	ИФ	М	СНИП
Укупно	42.006	71	12.07
Усредњено по чланку	4.667	7.889	1.341
Усредњено по аутору	11.455	19.826	3.314

### **3.1.4 Степен самосталности и степен учешћа у реализацији радова у научним центрима у земљи и иностранству**

Кандидат је први аутор у 7 радова, други аутор у 4 рада, а трећи аутор у 2 рада.

На радовима који су објављени у периоду након одлуке Научног већа о предлогу за стицање претходног звања, кандидат је први аутор 4 рада, други аутор 3, и трећи аутор 2 рада.

У периоду након доктората, кандидат је у свим публикацијама допринио имплементацијом нумеричких метода и/или продукцијом резултата, а активно је учествовао на формулисању тема радова, одабиру методологије, а често и предводио имплементацију и анализу резултата и поређење са експериментима. Кандидат је имао важну улогу у конципирању и писању већине публикација.

Нарочито у скорашњој линији рада везаној за дијаграматски Монте Карло, кандидат је самостално осмислио метод и у потпуности га имплементирао и истестирао, самостално продуковао резултате и написао публикацију, док је коаутор Мишел Фереро имао саветодавну улогу. Кандидат наставља да предводи ову линију рада.

У скорије време, кандидат предводи три линије рада у оквиру ПРОМИС пројекта Фонда за науку којег је руководилац, са сарадницима Михаилом Чубровићем, Аном Худомал, Вељком Јанковићем и Иваном Васић. Кандидат такође предводи сарадњу са Рокком Житком са Института Јожеф Стефан у Љубљани у коју је укључен и студент мастер студија Павле Стипсић.

У току боравка на постдокторском усавршавању у Француској, нарочито се истиче допринос кандидата у раду на методи угњеждених кластера (NCS). Кандидат је самостално открио симболичку технику којим се може уопштити NCS, самостално имплементирао велики број метода које се у том раду користе, и самостално добио највећи део резултата који су у раду приказани. Такође, кандидат је дао централни допринос у анализи добијених резултата и резултата из литературе доневши хипотезу о вези неуспеха појединих теорија и дивергенције иредуцибилног вертекса и предложивши начин да се та хипотеза провери.

У истом периоду, кандидат је предводио истраживање везано за суперпроводност у Хабардовом моделу, и предложио највећи број прорачуна и анализа које су у тој публикацији приказане.

### **3.1.5 Награде**

Кандидат је добитник Студентске награде Института за физику у Београду 2016. године за најбољу докторску дисертацију урађену током претходне године.

### **3.2 Ангажовање у формирању научних кадрова**

Кандидат др Јакша Вучичевић је у школској 2019/2020 био ментор Павла Стипсића, студента мастер студија на Физичком факултету Универзитета у Београду. Мастер рад је одбрањен 2. 10. 2020.

Током 2017-2019. кандидат је помагао у раду докторанда Willem-Victor van Gerven Oei-ја.

Кандидат је одржао два предавања у оквиру предмета Семинар савремене физике за студенте треће године основних студија на Физичком факултету у Београду на тему нумеричких метода у вишечестичној квантној физици, 2017. и 2019. године.

Кандидат је одржао једно предавање на семинару физике у Истраживачкој станици Петница, и био је ментор два полазника (Богдана Поповића и Богдана Рајкова).

### **3.3 Нормирање броја коауторских радова, патената и техничких решења**

Сви радови кандидата спадају у категорију у категорију радова са нумеричким симулацијама. Ти радови се признају са пуним бројем М бодова када број коаутора није већи од пет.

Број М бодова које је кандидат остварио након одлуке Научног већа о предлогу за стицање претходног научног звања је 71, а након нормирања радова са више од пет коаутора тај број постаје 67.04. Нормирање не утиче значајно на број бодова, а кандидат свакако има већи број бодова од захтеваног.

### **3.4 Руковођење пројектима, потпројектима и пројектним задацима**

Кандидат руководи ПРОМИС пројектом Фонда за науку "Хладни атоми, Хабардов модел и холографија: кључ за чудне метале" за период 2020-2021. год. На пројекту су ангажовани Михаило Чубровић, Ивана Васић и Ана Худомал.

Кандидат руководи српском страном билатералног пројекта са републиком Немачком (DAAD) "Електронске корелације у оксидима са трансфером наелектрисања: функције одзива и дугодометна уређења" за период 2020-2021. године.

Од 2018. године кандидат руководи потпројектом "Транспорт наелектрисања, суперпроводност и динамика решетке у јако корелисаним материјалима" у оквиру Центра изузетних вредности за изучавање комплексних система Института за физику у Београду. Тренутно ангажовани на потпројекту су др Дарко Танасковић, др Милош Радоњић, докторанд Willem-Victor van Gerven Oei и студент мастер студија Павле Стипсић.

### **3.5 Активност у научним и научно-стручним друштвима**

Кандидат је рецензент у следећим научним часописима: Physical Review Letters, Physical Review B, Physical Review E. Од октобра 2017. урадио је 34 рецензија.

Кандидат је такође Рецензент уредник у часопису Frontiers in Physics.

### **3.6 Утицајност научних резултата**

Утицајност научних резултата кандидата је наведена у одељку 3.1. Пун списак радова са бројем цитата је дат у прилогу.

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

Од 9 радова објављених у периоду након одлуке Научног већа Института за физику о предлогу за стицање претходног научног звања, у 8 радова су коаутори колеге из иностранства (Француска, САД, Словенија, Црна Гора), а у 5 су коаутори колеге из земље. Др Вучичевић је имао кључни допринос у публикацијама на којима је први аутор (4 рада) и други аутор (3 рада).

Кандидат је увек учествовао у избору теме и методологије, често самостално имплементирао методе и продуковао резултате, а дао је више пута и централни допринос у анализи и интерпретацији резултата као и поређењу са експериментима и радовима из литературе. Учествовао је у писању сваке публикације и често био задужен за конципирање рукописа. Детаљан опис доприноса за неке од појединачних публикација је дат у секцији 3.1.4.

### **3.8 Уводна предавања на конференцијама и друга предавања**

У периоду након одлуке Научног већа о предлогу за стицање претходног звања, кандидат је одржао 2 предавања по позиву на међународним конференцијама.

1. "Introducing the LMDB project", TRIQS (Toolbox for Research on Interacting Quantum Systems) meeting, 14-15. јун 2018. год., College de France, Париз, Француска.
2. "Conductivity in the Hubbard model", 20. Симпозијум физике кондензоване материје (СФКМ), 7-11. октобар 2019. год., Београд.

Кандидат је у истом периоду одржао и 4 семинара на Институту за физику:

1. "Beyond DMFT - capturing low temperature physics of the cuprates", 21. децембар 2016.
2. "C++ and Python - modern programming techniques", 28. фебруар 2017.
3. "Monte Carlo methods for general lattice fermions", 3. март 2017.
4. "Lattice Model Database (LMDB)", 5. јул 2018.

Др Вучичевић је одржао и предавање на Природно-математичком факултету у Новом Саду у оквиру радног састанка СПРУН (Семинар за примену рачунара у науци) 7.0: "Оптимизација дијаграматски Монте Карло методе за решење интерагујућих модела решетке: симболички алгоритми и аритметика високе прецизности", 26. децембар 2019.



#### 4. Елементи за квантитативну анализу рада

Остварени резултати у периоду након одлуке Научног већа о предлогу за стицање претходног научног звања:

Категорија	М бодова по раду	Број радова	Укупно М бодова	Нормирани број М бодова
M21a	10	2	20	18.333
M21	8	6	48	45.714
M23	3	1	3	3

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

Минималан број М бодова		Остварено М бодова без нормирања	Остварено М бодова са нормирањем
Укупно	50	71	67.047
M10+M20+M31+M32+M33+M41 +M42+M90	40	71	67.047
M11+M12+M21+M22+M23	30	71	67.047

Према бази података Scopus (Web of Science) на дан 16. септембра 2020. године, радови кандидата су цитирани укупно 190 (181) пута, односно 172(164) пута не рачунајући самоцитате. Према обе базе, Хиршов индекс кандидата је 8.

## 5. Закључак и предлог

Имајући у виду веома висок квалитет научноистраживачког рада др Јакше Вучичевића, као и његово значајно искуство у међународној сарадњи и руковођењу пројектима, мишљења смо да је кандидат достигао високу истраживачку зрелост и научну компетентност. На основу података из извештаја се види да испуњава све квантитативне и квалитативне услове за избор у звање виши научни сарадник прописане Правилником о поступку, начину вредновања и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата истраживача Министарства просвете, науке и технолошког развоја.

Због тога нам је задовољство да предложимо Научном већу Института за физику у Београду да донесе одлуку о прихватању предлога за избор др Јакше Вучичевића у звање виши научни сарадник.

У Београду, 9. 10. 2020.

Чланови комисије



др Дарко Танасковић  
научни саветник

Институт за физику у Београду



др Ненад Вукмировић  
научни саветник

Институт за физику у Београду



проф. др Ђорђе Спасојевић  
редовни професор

Физички факултет Универзитета у Београду