

ПРИМЉЕНО: 09.06.2022			
Рад.јед.	б р о ј	Арх.шифра	Прилог
0901	705/1		

## НАУЧНОМ ВЕЋУ ИНСТИТУТА ЗА ФИЗИКУ У БЕОГРАДУ

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

На седници Научног већа Института за физику у Београду одржаној 10. маја 2022. године именовани смо у комисију за избор др Марка Младеновића 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, чији су саставни део и прилози 1-8.

### 1. БИОГРАФСКИ И СТРУЧНИ 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. Тема истраживања његове мастер, а потом и докторске дисертације, била је испитивање атомске и електронске структуре органских полупроводника. Током својих докторских студија презентовао је своје резултате на више међународних конференција. 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. 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. За рад на својој докторској дисертацији награђен је Студентском наградом Института за физику, која је додељена 2018. године (за 2017. годину). У звање научни сарадник изабран је 29. 11. 2017. године.

Од марта 2017. до марта 2021. године кандидат је боравио на постдокторском усавршавању на Швајцарском федералном технолошком институту у Лозани

(EPFL) у групи проф. Урсуле Ротлисбергер. Тема његовог постдокторског истраживања била је испитивање перовскитних материјала за примену у соларним ћелијама. Кандидат је тесно сарађивао са експерименталном групом проф. Мајкла Грецела на истом институту, као и са експерименталном групом проф. Јоакима Мајера са Макс Планк Института за испитивање чврстог стања у Штутгарту. Од марта 2021. године кандидат борави на постдокторском усавршавању на Швајцарском федералном технолошком институту у Цириху (ETHZ) у групи проф. Матјуа Луизијеа. Теме његовог другог постдокторског ангажмана су симулације меморија са променом валенце на бази оксида и испитивање нелинеарног Покелсовог ефекта у оксидима. На првој теми кандидат сарађује са експерименталним групама са ETHZ и са IBM-овог центра за истраживања у Цириху, док на другој теми сарађује са компанијом Lumiphase. Током својих постдокторских ангажмана на EPFL и ETHZ кандидат је учествовао у супервизији једне мастер дисертације и помагао приликом израде једне докторске дисертације.

Др Марко Младеновић је у својој досадашњој каријери објавио 19 радова у међународним часописима (M21a, M21 и M22) који су цитирани 289 пута (према бази Web of Science) уз h-индекс 10.

## 2. ПРЕГЛЕД НАУЧНЕ АКТИВНОСТИ

Досадашњи научно-истраживачки рад др Марка Младеновића припада области физике кондензоване материје и може се поделити у следеће 4 целине:

- симулације и прорачун електронске структуре органских полупроводника,
- симулације и прорачун електронске структуре перовскита за примену у соларним ћелијама,
- симулације меморија са променом валенце на бази оксида,
- испитивање нелинеарног Покелсовог ефекта у перовскитним оксидима.

Прва целина се односи на рад кандидата на мастер раду и докторској дисертацији на Институту за физику у Београду и обухвата период пре избора у претходно научно звање. Друга целина се односи на период који обухвата рад кандидата на Институту за физику након одбране докторске дисертације, као и рад током постдокторског истраживања на Швајцарском федералном технолошком институту у Лозани. Последње две целине се односе на рад кандидата након недавног преласка на Швајцарски федерални технолошки институт у Цириху, те је рад на овим темама још увек у почетној фази.

У свом раду кандидат користи нумеричке симулације засноване на теорији функционала густине и на методама молекуларне динамике и Монте Карла. Користећи те методе изводи закључке везане за електронску структуру материјала, својства на границама домена унутар једног материјала или на граници између два материјала, испитује ефекте термалне неуређености у материјалу, дефекте на површини материјала итд.

## 2.1. Симулације и прорачун електронске структуре органских полупроводника

Кандидат је започео свој научно-истраживачки рад на Институту за физику у Београду у Лабораторији за примену рачунара у науци 2011. године. Током израде свог мастер рада и докторске дисертације 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 истраживање у овој области обухвата 4 теме:

- прорачун електронских стања на границама малих углова у поликристалним органским полупроводницима на бази малих молекула,
- испитивање утицаја термалне неуређености на електронске особине уређених конјугованих полимера,
- прорачун електронских стања на граници кристалног и аморфног домена у конјугованим полимерима и
- рачунање спонтане поларизације индуковане бочним ланцима у уређеном поли (3-хексилтиофену) (РЗНТ).

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 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 до краја разјашњен. Као пример органских полупроводника на бази малих молекула коришћен је нафталин. 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. Наведени резултати су представљени у раду [M21a-12].

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. 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. Резултати истраживања су дати у раду [M21-3].

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. Добијени резултати су објављени у раду [M21-4].

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. Закључено је да због ефеката спонтане поларизације, највиша стања у валентној зони су конфинирана са једне стране кристалног домена. На основу резултата ових истраживања кандидат је објавио рад [M21-5].

Део резултата из ове целине је описан и у прегледном раду [M21a-11].

## **2.2. Симулације и прорачун електронске структуре перовскитних једињења за примену у соларним ћелијама**

Рад кандидата у овој области се састоји од неколико тема:

- симулације и прорачун електронске структуре тродимензионалних перовскитних једињења
- симулације и прорачун електронске структуре дводимензионалних перовскитних једињења
- прорачун електронске структуре границе између домена у соларној ћелији на бази перовскитних једињења.

Истраживања у овој области се односе искључиво на период након избора у претходно звање, а обављена су на Институту за физику у Београду и на Швајцарском федералном технолошком институту у Лозани.

Перовскитни материјали на бази халогених елемената (јод, бром) имају потенцијалну примену у соларним ћелијама, јер измерна ефикасност соларних

ћелија на бази ових материјала износи преко 25%, што је упоредиво са традиционалним соларним ћелијама на бази силицијума. Постоје два основна разлога зашто соларне ћелије на бази халогених перовскита нису још увек доступне на тржишту: (1) њихова нестабилност на собној температури и (2) токсичност олова који је најчешћи метални елемент у перовскитним соларним ћелијама. Да би се умањио недостатак везан за нестабилност перовскита, потребно је детаљно испитати њихово понашање на собној температури. Кандидат је свој рад у овај области започео на Институту за физику. Тема истраживања је била испитивање ефеката термалног неуређења на електронске особине неколико перовскита на бази олова уз помоћ симулација на бази молекуларне динамике. Посебно је испитиван ефекат ротације органских катјона, као и ефекат термалног неуређења целе структуре. Закључено је да је ефекат ротације органских катјона мали у поређењу са другим ефектом. Такође, утврђено је да је ефекат термалног неуређења већи у материјалима са мањом константом решетке, уз изузетке који се могу повезати са степеном слободе ротације и транслагације органског катјона, као и јачином његовог диполног момента. Резултати овог истраживања су објављени у раду [M21-1].

Током свог постдокторског истраживања на Швајцарском федералном технолошком институту у Лозани кандидат се подробније бавио проблемом нестабилности перовскита на бази халогених елемената, као и проблемом токсичности олова. У вези са другим проблемом, кандидат је испитивао електронске особине перовскита на бази мешања олова и калаја, уз помоћ теорије функционала густине. Успевши да репродукује резултате експерименталних оптичких мерења, кандидат је идентификовао два ефекта која су присутна приликом мешања олова и калаја: (1) дисторзија кристалне решетке и (2) промена јачине спин-орбитне интеракције, објаснивши тиме нелинеарну зависност енергијског процепа од количине калаја у овим једињењима. Такође, кандидат се бавио испитивањем потенцијалне примене једињења на бази сребра, бизмута и јода у соларним ћелијама, што би било решење за токсично олово. Установљено је, прорачунима на бази теорије функционала густине и апроксимације ефективне масе, да је у овим једињењима, транспорт електрона и шупљина спор у одређеним правцима кристалне решетке, што доводи до локализације носилаца на собној температури и тиме лимитирања ефикасности соларне ћелије. Коначно, у сарадњи са истраживачима из групе проф. Урсуле Ротлисбергер, бавио се и испитивањем утицаја инкорпорације других, нестандартних органских катјона, попут гуанидинијума и диметиламонијума на стабилност перовскитног једињења на бази формаидинијум-олово јодида. Резултати истраживања су представљени у радовима у припреми и у објављеном раду [M21-2].

Познато је да дводимензионални перовскити на бази халогених елемената исказују већу стабилност од тродимензионалних. Ипак, њихова структура као и утицај органског молекула на целокупно једињење нису довољно познати. Кандидат је учествовао у креирању оквира за теоријско испитивање ових материјала, који су у том тренутку били потпуно неиспитани. Најпре је извршено поређење теоријских резултата на бази теорије функционала густине и молекуларне динамике са експерименталним резултатима у погледу структурних и електронских особина

дводимензионалних перовскита. Поређење је показало веома висок степен слагања ова два приступа. Потом је кандидат применио модел на дводимензионалне перовските на бази 5-амино валеричне киселине као органског молекула. Утврђена је зависност између дубине пенетрације органског молекула у неорганску решетку и симетрије неорганске решетке, а самим тим и електронских особине перовскита. Ова зависност је касније потврђена анализом која је укључила и друге молекуле као што су адатамантил-1-метанамонијум, адамантил-амонијум, нафталин-димид и (1,4-фенилен)-диметанамонијум. Поредивши понашање адатамантил-1-метанамонијума и адамантил-амонијума као органских молекула у дводимензионалним перовскитима, кандидат је установио да краћа амино група доводи до неуређености неорганске решетке, што је потврђено експерименталним мерењима. Такође, утврђено је да неки органски молекули попут гуанина и нафталин-димида учествују директно у транспорту електрона, због демонстриране локализације електрона на овим молекулима. У последњој фази свог постдокторског ангажмана на Швајцарском федералном технолошком институту у Лозани, кандидат се бавио и дводимензионалним перовскитима на бази мешавине халогених елемената (јода и брома), показавши нестабилност једињења са 50:50 односом јода и брома, што може бити објашњење за демонстрирано разлагање овог једињења на чиста једињења брома и јода при излагању оптичкој стимулацији. Истраживања дефеката у једињењима са 50:50 односом брома и јода, која се обављају у сарадњи са експерименталном групом проф. Јоакима Мајера, још увек су у току. Добијени резултати су објављени у радовима [M21a-1, M21a-2, M21a-3, M21a-4, M21a-5, M21a-7, M22-1, M21a-9, M21a-10].

Коначно, у склопу свог постдокторског ангажмана на Швајцарском федералном технолошком институту у Лозани, кандидат се бавио и испитивањем границе домена у соларној ћелији, која је често извор радијативне и нерадијативне рекомбинације носилаца. Конкретније, испитивана је граница домена између перовскитног једињења метиламонијум-олово јодида и титанијум диоксида, који служи као транспортни медијум за електроне. Прорачуном електронске структуре границе ових домена утврђено је постојање електронских стања у процепу перовскита, која потичу од хемијских веза јода са титанијум-диоксидом и од међупросторних атома јода, а која потенцијално умањују ефикасност соларне ћелије. Поред тога, испитивана је и улога ваканција атома кисеоника у титанијум-диоксиду, при чему је показана неопходност њиховог укључивања у модел границе, како би се добио реалистичан опис електронске структуре границе ова два домена. Паралелно са овим истраживањем, кандидат је, у сарадњи са експерименталном групом проф. Мајкла Грецела, испитивао дефекте на површини перовскита на бази формамидинијум-олово јодида, као и начине за њихову пасивизацију. Експериментално је показано да се инкорпорацијом комплекса на бази круне етра постиже побољшање карактеристика соларне ћелије. Кандидат је симулацијом интеракције перовскита са молекулом круне етра, уз помоћ теорије функционала густине, демонстрирао интеракцију круне са катјоном формамидинијума, што је значајно утицало на електронску структуру перовскита и делимичну пасивизацију електронских стања у енергијском процепу перовскита, насталих присуством дефекта ваканције јода. Поред улоге пасивизације дефеката

на површини, комплекси круне етра и цезијума реагују са површином перовскита, испоручујући катјоне цезијума перовскитном једињењу, који потом мењају електронске особине перовскита, што су експериментална мерења показала. Кандидат је својом прорачунима испитивао утицај распореда атома цезијума у перовскитном једињењу формаидинијум-олово јодида. Такође, утврђено је да ваканције формаидинијума на површини перовскита доводе до појаве стања у енергијском процепу перовскита, што је могуће пасивизирати катјонима цезијума. Из ових истраживања проистекли су радови [M21a-6, M21a-8].

### **2.3. Симулације меморија са променом валенце на бази оксида**

Централна тема постдокторског истраживања др Марка Младеновића на Швајцарском федералном технолошком институту у Цириху у групу проф. Матјуа Луизијеа јесу симулације меморија са променом валенце на бази оксида. Овај тип меморија је у последње време привукао пажњу истраживача због њихове потенцијалне примене у неуроморфним компјутерима. Принцип рада овог типа меморија се заснива на формирању проводног филамента састављеног од ваканција кисеоника у оксиду. Уколико је филамент формиран целом дужином оксида, тада се уређај налази у стању ниске отпорности, док се у случају да је филамент прекинут у једном свом делу, уређај се налази у стању високе отпорности. Кандидат је развио модел којим се симулирају ови уређаји у 3 корака. Први корак представља рачунање активационих енергија за процесе који се дешавају у уређају, попут дифузије ваканција и јона кисеоника, као и формирања и анихилације ваканција-јон пара. Ови параметри су добијени применом теорије функционала густине. Други корак се састоји у развоју и примени кинетичког Монте Карло метода, који користећи параметре из првог корака, извршава догађаје и даје као излазни податак дистрибуцију ваканција и јона кисеоника на датој температури, при датом примењеном напону и након датог времена. Коначно, у трећем кораку се врши прорачун транспортних особина структуре добијене у другом кораку, помоћу метода на бази неравнотежних Гринових функција. Развијени протокол, примењен и тестиран на хафмијум оксиду успешно репродукује експериментална мерења и биће коришћен за испитивање других оксида и типова уређаја на бази промене валенце.

### **2.4. Испитивање нелинеарног Покелсовог ефекта у перовскитним оксидима**

Као други правац истраживања у групи проф. Матјуа Луизијеа, др Марко Младеновић се бави испитивањем нелинеарног Покелсовог ефекта у перовскитном оксиду баријум-титан диоксиду. Кандидат је радио на овом пројекту у склопу менторства мастер студента Виржини д' Местрал. У том периоду развијен је модел за прорачун Покелсових коефицијената применом пертурбационе теорије функционала густине. Док се у случају електронског дела Покелсових коефицијената добијају добри резултати применом пертурбационе теорије функционала густине без укључивања ефекта термалног неуређења, за потребе прорачуна јонског дела Покелсових коефицијената потребно је укључити ефекат термалног неуређења посредством симулација на бази молекуларне динамике.

Развијени модел даје добре резултате у поређењу са експерименталним мерењима и биће примењен на истраживање ефекта ваканција кисеоника на Покелсове коефицијенте у баријум-титан диоксиду, као и на друге оксиде.

### 3. ЕЛЕМЕНТИ ЗА КВАЛИТАТИВНУ ОЦЕНУ НАУЧНОГ ДОПРИНОСА КАНДИДАТА

#### 3.1. Квалитет научних резултата

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

Др Марко Младеновић је у свом досадашњем раду објавио 20 радова у часописима М20 категорије, од којих 12 у категорији М21а, 5 у категорији М21, 2 у категорији М22 и 1 у категорији М24. Његови резултати су представљени и кроз 15 конференцијских саопштења, од тога 1 категорије М32, 13 категорије М34 и 1 категорије М63. Пун списак публикација кандидата дат је у прилогу 1 извештаја.

У периоду након одлуке Научног већа о предлогу за стицање претходног научног звања, др Марко Младеновић је објавио 13 радова у часописима М20 категорије од којих 10 у категорији М21а, 2 у категорији М21 и 1 у категорији М22. У овом периоду су његови резултати представљени кроз 6 конференцијских саопштења и то 1 категорије М32 и 5 категорије М34.

Као пет најзначајнијих радова током овог периода кандидата могу се узети следећи радови (број цитата на основу базе Web of Science):

1. M. Mladenović, N. Vukmirović,  
*Effects of Thermal Disorder on the Electronic Structure of Halide Perovskites: Insights from MD Simulations*,  
Phys. Chem. Chem. Phys. 20, 25693 (2018).  
DOI: 10.1039/C8CP03726D  
IF2016 = 4,123; SNIP2016 = 1,11; 2 аутора;  $M_{\text{norm}} = 8$  (рад са нумеричким симулацијама), 10 цитата, категорија М21
2. N. Ashari Astani, F. Jahanbakhshi, M. Mladenović, A. Q. M. Alanazi, I. Ahmadabadi, M. R. Ejtehadi, M. I. Dar, M. Grätzel, U. Rothlisberger,  
*Ruddlesden-Popper Phases of Methylammonium-based 2D Perovskites with 5-Ammonium Valeric Acid  $AVA_2MA_{n-1}Pb_nI_{3n+1}$  with  $n=1, 2$  and 3*,  
Journal of Physical Chemistry Letters 10, 3543 (2019).  
DOI: 10.1021/acs.jpcllett.9b01111  
IF2017 = 8,709; SNIP2017 = 1,57; 9 аутора;  $M_{\text{norm}} = 7,14$  (експериментални рад), 25 цитата, категорија М21а
3. F. Jahanbakhshi\*, M. Mladenović\*, E. Kneschaurek\*, L. Merten, M. G.-Rueda, P. Ahlawat, Y. Li, A. Dučinskas, A. Hinderhoffer, M. I. Dar, W. Tress, B. Carlsen, A.



Ummadisingu, S. M. Zakeeruddin, A. Hagfeldt, F. Schreiber, F. C. Grozema, U. Rothlisberger, J. V. Milić, M. Grätzel,  
*Unravelling Structural and Photophysical Properties of Adamantyl-Based Layered Hybrid Perovskites*,  
Journal of Materials Chemistry A 8, 17732 (2020).  
DOI: 10.1039/D0TA05022A  
IF2020 = 12,732; SNIP2019 = 1,66; 20 аутора;  $M_{norm} = 2,78$  (експериментални рад), 6 цитата, категорија M21a  
\*дељено прво ауторство

4. T.-S. Su, F. T. Eickemeyer, M. A. Hope, F. Jahanbakhshi, M. Mladenović, J. Li, Z. Zhou, A. Mishra, J.-H. Yum, D. Ren, A. Krishna, O. Ouellette, T.-C. Wei, H. Zhou, H.-H. Huang, M. D. Mensi, K. Sivula, S. M. Zakeeruddin, J. V. Milić, A. Hagfeldt, U. Rothlisberger, L. Emsley, H. Zhang, M. Grätzel,  
*Crown Ether Modulation Enables over 23% Efficient Formamidinium-based Perovskite Solar Cells*,  
Journal of the American Chemical Society 142, 19980 (2020).  
DOI: 10.1021/jacs.0c08592  
IF2020 = 15,419; SNIP2018 = 2,66; 24 аутора;  $M_{norm} = 2,27$  (експериментални рад), 53 цитата, категорија M21a
5. H. Zhang, F. T. Eickemeyer, Z. Zhou, M. Mladenović, F. Jahanbakhshi, L. Merten, A. Hinderhofer, M. A. Hope, O. Ouellette, A. Mishra, P. Ahlawat, D. Ren, T.-S. Su, A. Krishna, Z. Wang, Z. Dong, J. Guo, S. M. Zakeeruddin, F. Schreiber, A. Hagfeldt, L. Emsley, U. Rothlisberger, J. V. Milić, M. Grätzel,  
*Multimodal Host–Guest Complexation for Efficient and Stable Perovskite Photovoltaics*,  
Nature Communications 12, 3383 (2021).  
DOI: 10.1038/s41467-021-23566-2  
IF2020 = 14,919; SNIP2021 = 3,34; 24 аутора;  $M_{norm} = 2,27$  (експериментални рад), 8 цитата, категорија M21a

Први наведени рад је урађен у целости на Институту за физику у Београду. Тема рада је испитивање ефекта термалног неуређења перовскита на њихове електронске особине. Кандидат је самостално одабрао метод прорачуна, као и избор једињења која су узета у анализу, извршио симулације на бази молекуларне динамике, израчунао стандардну девијацију енергијског процепца у случајевима ротације органског катјона као и неуређења целе структуре. Такође је учествовао у дискусији и интерпретацији резултата заједно са коаутором. Рад је дао значајан допринос разумевању ефекта термалне неуређености на електронске особине перовскита, издвојивши ефекат неуређености органског катјона, који до тада није био испитан, и утврдивши корелацију између јачине ефекта термалне неуређености и константе решетке перовскита.

Преостали радови су урађени на Швајцарском федералном технолошком институту у Лозани, у групи проф. Урсуле Ротлисбергер, у сарадњи са другим истраживачима

из поменуте групе, као и са експерименталним групама. Кандидат је тесно сарађивао са истраживачем на докторским студијама Фарзана Јаханбакши, којој је помагао у изради докторске дисертације. Приликом израде другог наведеног рада, кандидат је имао значајну улогу у одабиру метода, активно је учествовао у прорачунима, и имао одлучујућу улогу у интерпретацији резултата. Тема овог рада су структурне и електронске особине дводимензионалних перовскита на бази 5-амино валеричне киселине. Наведених рад је један од првих теоријских радова у области дводимензионалних перовскита на бази халогених елемената. Посебно треба издвојити значај резултата који се односи на корелацију дубине пенетрације органског молекула у неорганску решетку и симетрију решетке, који до тада није био довољно истакнут.

У склопу трећег наведеног рада кандидат је имао значајну улогу у одабиру метода, извршио је самостално велики део прорачуна и имао одлучујућу улогу у интерпретацији резултата. Рад се бави испитивањем комплексне структуре дводимензионалних перовскита на бази адамантила као органског молекула. Симулације на бази молекуларне диманике које је кандидат применио дале су значајан допринос разумевању овог феномена, са посебним освртом на резултат којим се показује да дужина аминок групе молекула утиче на неуређеност неорганске решетке.

Радови под бројем 4 и 5 дали су велики допринос области соларних ћелија на бази перовскита јер предлажу до тада непознат метод за пасивизирање дефеката на површини перовскита и тиме повећање ефикасности соларне ћелије. У оба случаја кандидат је осмислио теоријски део истраживања, извршио већи део прорачуна и имао одлучујућу улогу у интерпретацији резултата. У раду 4 кандидат је својим симулацијама демонстрирао интеракцију круне етра са површином перовскита, што је поткрепљено прорачуном утицаја ове интеракције на електронске особине перовскита. У раду 5 теоријским прорачунима кандидата демонстриран је утицај ваканција формамидинијума на површини перовскита на његову електронску структуру, као и ефекат инкорпорације атома цезијума. Поред тога, дат је значајан допринос разумевању утицаја цезијума на електронске особине перовскита на бази формамидинијум-олово јодида.

### **3.1.2. Цитираност научних радова кандидата**

Према подацима из базе Web of Science (видети прилог 2 извештаја), радови кандидата су до 1. маја 2022. цитирани 321 пут, од чега 289 пута без ауоцитата. h-индекс кандидата је 10.

Радови кандидата су цитирани у водећим часописима, попут *Science*, *Nature Chemistry*, *Journal of the American Chemical Society* и многим другим.

### **3.1.3. Параметри квалитета радова и часописа**

Процена квалитета часописа у којима је кандидат објављивао се може учинити на основу импакт фактора. Импакт фактор (ИФ) се мења из године у годину, па ниже наводимо најбољу вредност из периода до две године уназад од када је рад објављен. Подвученим су означени радови објављени након одлуке Научног већа о предлогу за стицање претходног научног звања.

1. 3 рада (0+3) у часопису *Journal of the American Chemical Society* (категорија M21a) (ИФ: 1. рад 14,695; 2. рад 15,419; 3. рад 15,419)
2. 2 рада (1+1) у часопису *Advanced Functional Materials* (категорија M21a) (ИФ: 1. рад 11,805; 2. рад 18,808)
3. 1 рад (0+1) у часопису *Advanced Energy Materials* (категорија M21a) (ИФ: 1 рад 29,368)
4. 1 рад (0+1) у часопису *Journal of Physical Chemistry Letters* (категорија M21a) (ИФ: 1 рад 8,709)
5. 1 рад (0+1) у часопису *Angewandte Chemie International Edition* (категорија M21a) (ИФ: 1 рад 15,336)
6. 1 рад (0+1) у часопису *Journal of Materials Chemistry A* (категорија M21a) (ИФ: 1. рад 12,732)
7. 1 рад (0+1) у часопису *Nature Communications* (категорија M21a) (ИФ: 1. рад 14,919)
8. 1 рад (0+1) у часопису *Chemistry of Materials* (категорија M21a) (ИФ: 1 рад 9,811)
9. 3 рада (3+0) у часопису *Journal of Physical Chemistry C* (категорија M21a за 1 рад и M21 за два рада) (ИФ: 1. рад 4,835; 2. рад 4,835; 3. рад 4,722)
10. 3 рада (1+2) у часопису *Physical Chemistry Chemical Physics* (категорија M21) (ИФ: 1. рад 4,493; 2. рад 4,123; 3. рад 3,676)
11. 1 рад (0+1) у часопису *Helvetica Chimica Acta* (категорија M22) (ИФ: 1 рад 2,309)
12. 1 рад (1+0) у часопису *Physica Scripta* (категорија M22) (ИФ: 1 рад 1,296)
13. 1 рад (1+0) у часопису *Serbian Journal of Electrical Engineering* (категорија M24)

Укупан импакт фактор радова кандидата је 197,36, а у периоду након одлуке Научног већа о предлогу за стицање претходног научног звања тај фактор је 165,32.

Приметан је изузетан квалитет часописа у којима је кандидат објављивао, при чему се истичу часописи *Nature Communications*, *Advanced Energy Materials*, *Advanced Functional Materials*, *Journal of the American Chemical Society*, *Angewandte Chemie International Edition*, *Journal of Materials Chemistry A*, *Chemistry of Materials*, *Journal of Physical Chemistry Letters*.

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 импакту цитирајућег чланка (СНИП) (користимо најбољу вредност из периода до две године уназад од објаве рада). У табели су дате укупне вредности, као и вредности свих фактора усредњених по броју чланака и нормиране на број аутора. Табела се односи на резултате категорија М21-М23.

	ИФ	М	СНИП
Укупно	165,32	121	26,55
Усредњено по чланку	12,72	9,31	2,04
Нормирано на број аутора	12,83	12,75	2,29

Исти подаци за целокупну каријеру кандидата дати су у следећој табели:

	ИФ	М	СНИП
Укупно	197,36	170	35,41
Усредњено по чланку	10,39	8,95	1,86
Нормирано на број аутора	27,83	34,75	6,35

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

У току свог досадашњег научно-истраживачког рада кандидат је објавио 8 радова категорије М20 као први аутор и један рад на коме је коаутор са једнаким учешћем као и први аутор. На осталих 11 радова, кандидат је коаутор.

Кандидат је показао висок степен самосталности у току израде свих објављених радова. Све прорачуне везане за радове урађене на Институту за физику у Београду кандидат је извршио самостално, а у великој мери је и допринео интерпретацији резултата. У току свог рада на Швајцарском федералном технолошком институту у Лозани, кандидат је често предлагао метод и правац истраживања и у великој мери учествовао у прорачунима и интерпретацији добијених резултата. Конкретан допринос кандидата у 5 најзначајнијих радова у изборном периоду наведен је у одељку 3.1.1, а у одељку 2 је наведен конкретан допринос кандидата у оквиру истраживачких тема којима се бавио.

#### ***3.1.5. Награде***

Кандидат је добитник Студентске награде Института за физику у Београду 2018. године (за 2017. годину) за најбољу докторску дисертацију урађену током претходне године.

Током докторских студија кандидат је добио следеће награде:

- награда за најбољег младог истраживача на конференцији Европског друштва за материјале (European Materials Research Society Spring Meeting 2014), одржаној у Лилу (Француска) у секцији Компјутерско моделовање

органичних полупроводника.

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

У прилогу 3 извештаја дати су докази о овим наградама.

### **3.1.6. Елементи применљивости научних резултата**

Кандидат се бави теоријом и нумеричким симулацијама електронских материјала. Сарадња кандидата са водећим светским групама у области перовскитних соларних ћелија је довела до реализације ових соларних ћелија са знатно побољшаном ефикасношћу, што би у будућности могло да доведе до глобалног утицаја уколико поменуте соларне ћелије уђу у ширу примену.

### **3.2. Ангажованост у формирању научних кадрова**

Током свог ангажмана на Швајцарском федералном технолошком институту у Лозани, кандидат је помогао изради докторске дисертације Фарзана Јахамбакши са којом има 10 заједничких радова [M21a-1, M21a-2, M21a-3, M21a-4, M21a-5, M21a-6, M21a-7, M21a-8, M21a-9, M22-1].

Током свог ангажмана на Швајцарском федералном технолошком институту у Цириху, кандидат је био ментор мастер рада Виржини д'Местрал.

У прилогу 4 извештаја дати су докази о наведеним ангажманима кандидата у формирању научних кадрова.

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

Након претходног избора у звање, кандидат је објавио укупно 13 радова категорије M20. Од тога 10 радова је урађено у сарадњи са другим експерименталним групама, па се наведени радови признају са пуним бројем M бодова до седам коаутора. Преостала 3 рада спадају у категорију радова са нумеричким симулацијама, који се признају са пуним бројем M бодова до пет коаутора. Уз сваки рад у прилогу 1 извештаја је наведен тип рада и нормирани број M бодова.

Број M бодова које је кандидат остварио након одлуке Научног већа о предлогу за стицање претходног научног звања је 125, а након нормирања тај број постаје 58,59. Нормирање значајно утиче на број бодова кандидата, али и након нормирања кандидат има довољан број бодова за избор у звање виши научни сарадник. Потребно је истаћи да је за истраживања у области соларних ћелија потребно формирати веће тимове физичара, хемичара, инжењера и технолога са експертизама у области синтезе и карактеризације материјала, производње и карактеризације соларних ћелија и теорије и моделовања процеса у материјалу и соларној ћелији. Кандидат је у оваквим тимовима дао одлучујући допринос у

теорији и симулацијама. С обзиром да су овакви тимови бројали и преко двадесет чланова, нормирање је довело до тога да се радови објављени у изузетно квалитетним часописима (са импакт фактором преко 10) након нормирања обрачунавају са свега око 2-3 М бода. Мишљење комисије је да такво нормирање у превеликој мери умањује допринос кандидата овим истраживањима.

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

У току свог ангажмана на Институту за физику у Београду, 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-јун 2017),
- 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).

У оквиру ОН171017 пројекта, кандидат је руководио пројектним задатком: ”Испитивање ефекта термалног неуређења на електронске особине перовскита на бази халогених елемената” у периоду од августа 2016. године до јуна 2017. године.

У току свог ангажмана на Швајцарском федералном технолошком институту у Лозани, кандидат је био ангажован на следећим пројектима:

- пројекат Швајцарске националне научне фондације “NCCR MUST - Molecular Ultrafast Science and Technology” (март 2017-мај 2017),
- пројекат Швајцарске националне научне фондације “NCCR MARVEL- Materials’ Revolution: Computational Design and Discovery of Novel Materials” (мај 2017-јануар 2018),
- пројекат Швајцарске националне научне фондације “EPISODE: Engineering of advanced hybrid Perovskite for Integration with Silicon photovoltaic Optoelectronic DEvice ” (фебруар 2018 - децембар 2019).

У оквиру ових пројеката кандидат је руководио пројектним задацима.

У току свог ангажмана на Швајцарском федералном технолошком институту у Цириху, кандидат је био ангажован на следећем пројекту:

- пројекат Швајцарске националне научне фондације “Advanced Learning Methods on dedicated nano-Devices” (март 2021 - март 2022).

У прилогу 5 извештаја су дати докази о руковођењу пројектним задацима.

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

Кандидат је рецензирао један рад у часопису *Physical Chemistry Chemical Physics*.

Кандидат је био члан организационог комитета конференције The 19<sup>th</sup> Symposium on Condensed Matter Physics.

У прилогу 6 извештаја дати су докази.

### **3.6. Утицај научних резултата**

Утицајност научних резултата кандидата је наведена у одељцима 2 и 3.1. Подаци о цитираности према бази Web of Science су наведени у одељку 3.1.2.

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

Већина радова објављена након избора у претходно научно звање је урађена на Швајцарском федералном технолошком институту у Лозани у сарадњи са експерименталним групама, углавном из Швајцарске, али и из других земаља. Један рад је урађен на Институту за физику у Београду у сарадњи са др Ненадом Вукмировићем.

Кандидат је дао значајан допринос свим објављеним радовима. Често је предлагао метод и правац истраживања и учествовао је у прорачунима и интерпретацији резултата. Конкретни доприноси кандидата најистакнутијим радовима након избора у претходно звање дати су у одељку 3.1.1, а у одељку 2 је наведен конкретан допринос кандидата у оквиру истраживачких тема којима се бавио.

### **3.8. Уводна предавања на конференцијама, друга предавања и активности**

Након утврђивања предлога за избор у претходно звање на седници Научног већа Института за физику у Београду, др Марко Младеновић је одржао једно предавање по позиву:

M. Mladenović, N. Vukmirović,  
*Electronic Properties of interfaces Between Domains in Organic Semiconductors*,  
The 6<sup>th</sup> International School and Conference on Photonics, Book of Abstracts, p. 43  
28 August – 1 September 2017, Belgrade, Serbia

У прилогу 7 извештаја дат је доказ.

#### 4. ЕЛЕМЕНТИ ЗА КВАНТИТАТИВНУ ОЦЕНУ НАУЧНОГ ДОПРИНОСА КАНДИДАТА

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	10	100	34,43
M21	8	2	16	16
M22	5	1	5	4,17
M32	1,5	1	1,5	1,5
M34	0,5	5	2,5	2,5

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

Минимални број М бодова		Остварено М бодова, без нормирања	Остварено М бодова, са нормирањем
Укупно	50	125	58,59
M10+M20+M31+M32+M33+M41+M42+M90	40	122,5	56,09
M11+M12+M21+M22+M23	30	121	54,59



## 5. ЗАКЉУЧАК

Др Марко Младеновић у потпуности испуњава све услове за избор у звање виши научни сарадник предвиђене Правилником о стицању истраживачких и научних звања Министарства просвете, науке и технолошког развоја. У досадашњој каријери остварио је оригиналне и веома значајне научне резултате који побољшавају наше разумевање органских и перовскитних полупроводничких материјала. У сарадњи са водећим експерименталним групама из области соларних ћелија ти резултати су довели до реализације перовскитних соларних ћелија са знатно побољшаном ефикасношћу што би у будућности могло да доведе и до глобалног утицаја уколико ове соларне ћелије уђу у ширу примену.

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 виши научни сарадник.

У Београду, 8. јун 2022. год.

Чланови комисије:

др Антун Балаж  
Научни саветник  
Институт за физику у Београду

др Ненад Вукмировић  
Научни саветник  
Институт за физику у Београду

др Дарко Танасковић  
Научни саветник  
Институт за физику у Београду

др Јелена Радовановић  
Редовни професор  
Универзитет у Београду - Електротехнички факултет

## ПРИЛОГ 1

Списак радова др Марка Младеновића

## СПИСАК ОБЈАВЉЕНИХ РАДОВА др МАРКА МЛАДЕНОВИЋА

### РАДОВИ ОБЈАВЉЕНИ НАКОН УТВРЂИВАЊА ПРЕДЛОГА ЗА ИЗБОР У ЗВАЊЕ НАУЧНИ САРАДНИК (после 21. марта 2017)

У овом прилогу се налази списак радова кандидата. Копије апстраката конференцијских саопштења категорије М32 и М34 представљених у изборном периоду се налазе у прилогу 8.

#### Радови у међународним часописима изузетних вредности (М21а):

[M21a-1] N. Ashari Astani, F. Jahanbakhshi, M. Mladenović, A. Q. M. Alanazi, I. Ahmadabadi, M. R. Ejtehadi, M. I. Dar, M. Grätzel, U. Rothlisberger, *Ruddlesden-Popper Phases of Methylammonium-based 2D Perovskites with 5-Ammonium Valeric Acid  $AVA_2MA_{n-1}Pb_nI_{3n+1}$  with  $n=1, 2$  and  $3$* , Journal of Physical Chemistry Letters 10, 3543 (2019).  
DOI: 10.1021/acs.jpcclett.9b01111

IF2017 = 8,709; SNIP2017 = 1,57; 9 аутора;  $M_{\text{norm}} = 7,14$  (експериментални рад)

[M21a-2] A. Q. Alanazi, D. J. Kubicki, D. Prochowitz, E. Alharbi, M. Bouduban, F. Jahanbakhshi, M. Mladenović, J. V. Milić, F. Gioradano, D. Ren, A. Y. Alyamani, H. Albrithen, A. Albadri, M. H. Alotaibi, J.-E. Moser, S. M. Zakeeruddin, U. Rothlisberger, L. Emsley, M. Grätzel, *Atomic-Level Microstructure of Efficient Formamidinium-Based Perovskite Solar Cells Stabilized by 5-Ammonium Valeric Acid Iodide Revealed by Multi-Nuclear and Two-Dimensional Solid-State NMR*, Journal of the American Chemical Society 141, 17659 (2019).  
DOI: 10.1021/jacs.9b07381

IF2018 = 14,695; SNIP2018 = 2,66; 19 аутора;  $M_{\text{norm}} = 2,94$  (експериментални рад)

[M21a-3] L. Hong, J. V. Milić, P. Ahlawat, M. Mladenović, F. Jahanbakhshi, D. J. Kubicki, D. Ren, M. C. Gélvez-Rueda, M. A. Ruiz-Preciado, A. Ummadasingu, Y. Li, C. Tian, L. Pan, S. M. Zakeeruddin, A. Hagfeldt, F. C. Grozema, U. Rothlisberger, L. Emsley, H. Han, M. Grätzel, *Guanine-Stabilized Formamidinium Lead Iodide Perovskites*, Angewandte Chemie International Edition 59, 4691 (2020).  
DOI: 10.1002/anie.201912051

IF2020 = 15,336; SNIP2020 = 2,24; 20 аутора;  $M_{\text{norm}} = 2,78$  (експериментални рад)

[M21a-4] M. G.-Rueda, P. Ahlawat, L. Merten, F. Jahanbakhshi, M. Mladenović, A. Hinderhofer, M. I. Dar, Y. Li, A. Dučinskas, B. Carlsen, W. Tress, A. Ummadasingu, S. M. Zakeeruddin, F. Schreiber, A. Hagfeldt, U. Rothlisberger, F. C. Grozema, J. V. Milić, M. Grätzel, *Formamidinium-Based Dion-Jacobson Layered Hybrid Perovskites: Structural Complexity and Optoelectronic Properties*, Advanced Functional Materials 30, 2003428 (2020).

DOI: 10.1002/adfm.202003428

IF2020 = 18,808; SNIP2019 = 2,43; 19 аутора;  $M_{\text{norm}} = 2,94$  (експериментални рад)

[M21a-5] F. Jahanbakhshi\*, M. Mladenović\*, E. Kneschaurek\*, L. Merten, M. G.-Rueda, P. Ahlawat, Y. Li, A. Dučinskas, A. Hinderhoffer, M. I. Dar, W. Tress, B. Carlsen, A. Ummadisingu, S. M. Zakeeruddin, A. Hagfeldt, F. Schreiber, F. C. Grozema, U. Rothlisberger, J. V. Milić, M. Grätzel,  
*Unravelling Structural and Photophysical Properties of Adamantyl-Based Layered Hybrid Perovskites,*

Journal of Materials Chemistry A 8, 17732 (2020).

DOI: 10.1039/D0TA05022A

IF2020 = 12,732; SNIP2019 = 1,66; 20 аутора;  $M_{\text{norm}} = 2,78$  (експериментални рад)

\*дељено прво ауторство

[M21a-6] T.-S. Su, F. T. Eickemeyer, M. A. Hope, F. Jahanbakhshi, M. Mladenović, J. Li, Z. Zhou, A. Mishra, J.-H. Yum, D. Ren, A. Krishna, O. Ouellette, T.-C. Wei, H. Zhou, H.-H. Huang, M. D. Mensi, K. Sivula, S. M. Zakeeruddin, J. V. Milić, A. Hagfeldt, U. Rothlisberger, L. Emsley, H. Zhang, M. Grätzel,

*Crown Ether Modulation Enables over 23% Efficient Formamidinium-based Perovskite Solar Cells,*

Journal of the American Chemical Society 142, 19980 (2020).

DOI: 10.1021/jacs.0c08592

IF2020 = 15,419; SNIP2018 = 2,66; 24 аутора;  $M_{\text{norm}} = 2,27$  (експериментални рад)

[M21a-7] M. A. Hope, T. Nakamura, P. Ahlawat, A. Mishra, M. Cordova, F. Jahanbakhshi, M. Mladenović, R. Runjhun, L. Merten, A. Hinderhofer, B. I. Carlsen, D. J. Kubicki, R. Gershoni-Poranne, T. Schneeberger, L. C. Carbone, Y. Liu, S. M. Zakeeruddin, J. Lewinski, A. Hagfeldt, F. Schreiber, U. Rothlisberger, M. Grätzel, J. V. Milić, L. Emsley,

*Nanoscale Phase Segregation in Supramolecular  $\pi$ -Templating for Hybrid Perovskite Photovoltaics from NMR Crystallography,*

Journal of the American Chemical Society 143, 1529 (2021).

DOI: 10.1021/jacs.0c11563

IF2020 = 15,419; SNIP2019 = 2,65; 24 аутора;  $M_{\text{norm}} = 2,27$  (експериментални рад)

[M21a-8] H. Zhang, F. T. Eickemeyer, Z. Zhou, M. Mladenović, F. Jahanbakhshi, L. Merten, A. Hinderhofer, M. A. Hope, O. Ouellette, A. Mishra, P. Ahlawat, D. Ren, T.-S. Su, A. Krishna, Z. Wang, Z. Dong, J. Guo, S. M. Zakeeruddin, F. Schreiber, A. Hagfeldt, L. Emsley, U. Rothlisberger, J. V. Milić, M. Grätzel,

*Multimodal Host–Guest Complexation for Efficient and Stable Perovskite Photovoltaics,* Nature Communications 12, 3383 (2021).

DOI: 10.1038/s41467-021-23566-2

IF2020 = 14,919; SNIP2021 = 3,34; 24 аутора;  $M_{\text{norm}} = 2,27$  (експериментални рад)

[M21a-9] A. Mishra, P. Ahlawat, G. C. Fish, F. Jahanbakhshi, M. Mladenović, M. Almalki, M. A. Ruiz-Preciado, M. C. Gelvéz-Rueda, D. J. Kubicki, P. A. Schouwink, V.

Dufoulon, T. Schneeberger, A. Aslanzadeh, F. C. Grozema, S. M. Zakeeruddin, J.-E. Moser, U. Rothlisberger, L. Emsley, J. V. Milić, M. Grätzel, *Naphthalenediimide/Formamidinium-Based Low-Dimensional Perovskites*, *Chemistry of Materials* 33, 6412 (2021).

DOI: 10.1021/acs.chemmater.1c01635

IF2020 = 9,811; SNIP2019 = 1,78; 20 аутора;  $M_{\text{norm}} = 2,78$  (експериментални рад)

[M21a-10] Y.-R. Wang, A. Senocrate, M. Mladenović, A. Dučinskas, G. Y. Kim, U. Rothlisberger, J. V. Milić, D. Moia, M. Grätzel, J. Maier, *Photo De-Mixing in Dion-Jacobson 2D Mixed Halide Perovskites*, *Advanced Energy Materials* 220768 (2022).

DOI: 10.1002/aenm.202200768

IF2020 = 29,368; SNIP2021 = 3,18; 10 аутора;  $M_{\text{norm}} = 6,25$  (експериментални рад)

### **Радови у врхунским међународним часописима (M21):**

[M21-1] M. Mladenović, N. Vukmirović,

*Effects of Thermal Disorder on the Electronic Structure of Halide Perovskites: Insights from MD Simulations*,

*Physical Chemistry Chemical Physics* 20, 25693 (2018).

DOI: 10.1039/C8CP03726D

IF2016 = 4,123; SNIP2016 = 1,11; 2 аутора;  $M_{\text{norm}} = 8$  (рад са нумеричким симулацијама)

[M21-2] A. Boziki, M. Mladenović, M. Grätzel, U. Rothlisberger,

Why Choosing the Right Partner is Important: Stabilization of Ternary  $\text{Cs}_y\text{GUA}_x\text{FA}_{(1-y-x)}\text{PbI}_3$  Perovskites, *Physical Chemistry Chemical Physics* 22, 20880 (2020).

DOI: 10.1039/D0CP03882B

IF2020 = 3,676; SNIP2018 = 0,99; 4 аутора;  $M_{\text{norm}} = 8$  (рад са нумеричким симулацијама)

### **Радови у истакнутим међународним часописима (M22):**

[M22-1] F. Jahanbakhshi, M. Mladenović, M. Dankl, A. Boziki, P. Ahlawat, U. Rothlisberger

*Organic Spacers in 2D Perovskites: General Trends and Structure-Property Relationships from Computational Studies*

*Helvetica Chimica Acta* 104, e2000232 (2021).

DOI: 10.1002/hlca.202000232

IF2019 = 2,309; SNIP2019 = 0,56; 6 аутора;  $M_{\text{norm}} = 4,17$  (рад са нумеричким симулацијама)

**Предавање по позиву са међународног скупа штампана у изводу (M32):**

[M32-1] M. Mladenović, N. Vukmirović,  
*Electronic Properties of interfaces Between Domains in Organic Semiconductors*,  
The 6<sup>th</sup> International School and Conference on Photonics, Book of Abstracts, p. 43  
28 August – 1 September 2017, Belgrade, Serbia  
 $M_{\text{norm}} = 1,5$

**Саопштења са међународног скупа штампана у изводу (M34):**

[M34-1] M. Mladenović, U. Rothlisberger,  
*First-Principles Calculations of Halide Perovskites*,  
The 10<sup>th</sup> International Conference on Hybrid and Organic Photovoltaics, Talk C1-O8,  
28 - 31 May 2018, Benidorm, Spain.  
 $M_{\text{norm}} = 0,5$

[M34-2] M. Mladenović, U. Rothlisberger,  
*Lead-Free Materials for Solar Cells Applications*,  
European Materials Research Society Spring Meeting 2019, Talk G.6.3,  
27-31 May 2019, Nice, France.  
 $M_{\text{norm}} = 0,5$

[M34-3] F. Jahanbakhshi, M. Mladenović, N. Ashari-Astani, U. Rothlisberger,  
*The Role of Spacer Molecules in Designing 2D Ruddlesden-Popper Perovskites*,  
European Materials Research Society Spring Meeting 2019, Talk G.14.5,  
27-31 May 2019, Nice, France.  
 $M_{\text{norm}} = 0,5$

[M34-4] A. Boziki, S. Meloni, M. Mladenović, U. Rothlisberger,  
*Atomistic Origins of the Preferential Stabilization of Perovskite over Non-Perovskite Phases of Mixed Cation Lead Halide Perovskites*,  
The 10th Triennial Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics, Poster P2-46,  
11-17 July 2019, Tromsø, Norway.  
 $M_{\text{norm}} = 0,5$

[M34-5] M. Mladenović, F. Jahanbakhshi, U. Rothlisberger,  
*Ruddlesden-Popper Phases of 2D Halide Perovskites*,  
The 20th Symposium on Condensed Matter Physics, Book of Abstracts, p. 62,  
7-11 October 2019, Belgrade, Serbia  
 $M_{\text{norm}} = 0,5$

**РАДОВИ ОБЈАВЉЕНИ ПРЕ УТВРЂИВАЊА ПРЕДЛОГА ЗА ИЗБОР У  
ЗВАЊЕ НАУЧНИ САРАДНИК (пре 21. марта 2017)**

**Радови у међународним часописима изузетних вредности (M21a):**

[M21a-11] M. Mladenović, N. Vukmirović,  
*Charge Carrier Localization and Transport in Organic Semiconductors: Insights from Atomistic Multiscale Simulations*,  
Advanced Functional Materials 25, 1915 (2015).  
DOI: 10.1002/adfm.201402435  
IF2014 = 11,805; SNIP2014 = 2,57; 2 аутора;  $M_{\text{norm}} = 10$  (рад са нумеричким симулацијама)

[M21a-12] M. Mladenović, N. Vukmirović, I. E. Stanković,  
*Electronic States at Low-Angle Grain Boundaries in Polycrystalline Naphthalene*,  
Journal of Physical Chemistry C 117, 15741 (2013).  
DOI: 10.1021/jp404825h  
IF2013 = 4,835; SNIP2011 = 1,46; 3 аутора;  $M_{\text{norm}} = 10$  (рад са нумеричким симулацијама)

**Радови у врхунским међународним часописима (M21):**

[M21-3] M. Mladenović, N. Vukmirović,  
*Effects of Thermal Disorder on the Electronic Properties of Ordered Polymers*,  
Physical Chemistry Chemical Physics 16, 25950 (2014).  
DOI: 10.1039/C4CP04425H  
IF2014 = 4,493; SNIP2014 = 1,22; 2 аутора;  $M_{\text{norm}} = 8$  (рад са нумеричким симулацијама)

[M21-4] M. Mladenović, N. Vukmirović,  
*Electronic States at the Interface Between Crystalline and Amorphous Domains in Conjugated Polymers*,  
Journal of Physical Chemistry C 119, 23329 (2015).  
DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b06673  
IF2013 = 4,835; SNIP2013 = 1,44; 2 аутора;  $M_{\text{norm}} = 8$  (рад са нумеричким симулацијама)

[M21-5] M. Mladenović, N. Vukmirović,  
*Spontaneous Polarization Induced by Side Chains in Ordered Poly(3-hexylthiophene)*,  
Journal of Physical Chemistry C 120, 18895 (2016).  
DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b05551  
IF2014 = 4,772; SNIP2014 = 1,42; 2 аутора;  $M_{\text{norm}} = 8$  (рад са нумеричким симулацијама)

### **Радови у истакнутим међународним часописима (M22):**

[M22-2] M. Mladenović, N. Vukmirović, I. E. Stanković,  
*Atomic and Electronic Structure of Grain Boundaries in Crystalline Organic Semiconductors*,  
Physica Scripta T 157, 014061 (2013).  
DOI: 10.1088/0031-8949/2013/T157/014061  
IF2013 = 1,296; SNIP2013 = 0,75; 3 аутора;  $M_{\text{norm}} = 5$  (рад са нумеричким симулацијама)

### **Радови у националним часописима међународног значаја (M24):**

[M24-1] M. Mladenović, I. E. Stanković,  
*Monte Carlo Simulations of Crystalline Organic Semiconductors*,  
Serbian Journal of Electrical Engineering 10, 125 (2013).  
DOI: 10.2298/SJEE1301125M  
 $M_{\text{norm}} = 2$  (рад са нумеричким симулацијама)

### **Саопштења са међународног скупа штампана у изводу (M34):**

[M34-6] M. Mladenović, I. E. Stanković, N. Vukmirović,  
*Atomic and Electronic Structure of Grain Boundaries in Crystalline Organic Semiconductors*,  
The 3<sup>rd</sup> International Conference on Optical Materials, Book of Abstracts, p. 90,  
3-6 September 2012, Belgrade, Serbia.

[M34-7] M. Mladenović, N. Vukmirović, I. E. Stanković,  
*Simulations of Electronic States at Grain Boundaries in Poly-crystalline Naphthalene*,  
DPG Spring Meeting 2013, Poster HL69.12,  
10-15 March 2013, Regensburg, Germany.  
 $M_{\text{norm}} = 0,5$

[M34-8] M. Mladenović, N. Vukmirović, I. E. Stanković,  
*Electronic Properties of Grain Boundaries in Polycrystalline Naphthalene*,  
European Materials Research Society Spring Meeting 2013, Poster PII-15,  
27-31 May 2013, Strasbourg, France.  
 $M_{\text{norm}} = 0,5$

[M34-9] M. Mladenović, N. Vukmirović, I. E. Stanković,  
*Electronic States at Grain Boundaries in Polycrystalline Naphthalene*,



The 6th International Symposium on Flexible Organic Electronics, Book of Abstracts,  
p.14,  
8-11 July 2013, Thessaloniki, Greece.  
 $M_{\text{norm}} = 0,5$

[M34-10] M. Mladenović, N. Vukmirović,  
*Effects of Dynamic Disorder on the Electronic Structure of Crystalline Poly-3-hexylthiophene,*  
European Materials Research Society Spring Meeting 2014, Presentation O.13.5,  
25-30 May 2014, Lille, France.  
 $M_{\text{norm}} = 0,5$

[M34-11] N. Vukmirović, M. Mladenović,  
*Simulation Insights into Electronic Properties of Disordered Organic Semiconductors,*  
The 26th International Conference on Nanocrystalline and Amorphous Semiconductors,  
Book of Abstracts, p. 69  
13-18 September 2015, Aachen, Germany.  
 $M_{\text{norm}} = 0,5$

[M34-12] M. Mladenović, N. Vukmirović,  
*Electronic States at the Interface Between Crystalline and Amorphous Domains in Conjugated Polymers,*  
The 19<sup>th</sup> Symposium on Condensed Matter Physics, Book of Abstracts, p. 7  
7-11 September 2015, Belgrade, Serbia  
 $M_{\text{norm}} = 0,5$

[M34-13] M. Mladenović, N. Vukmirović,  
*Electronic Properties of Interfaces Between Domains in Organic Semiconductors,*  
Gordon Research Conference: Electronic Processes in Organic Materials, Poster 63,  
6-10 July 2016, Lucca (Barga), Italy.  
 $M_{\text{norm}} = 0,5$

### **Саопштење са скупа националног значаја штампано у целини (M63)**

[M63-1] M. Mladenović, I. E. Stanković,  
*Monte Karlo simulacije kristalnih organskih poluprovodnika,*  
56. ETRAN, Zbornik radova, p.48,  
11-14 jun 2012, Zlatibor, Srbija.  
 $M_{\text{norm}} = 1$

## ПРИЛОГ 2

Подаци о цитираности из базе Web of Science

Search > Citation Report: MLADENOVIC, M. > Citation Report: MLADENOVIC, M. (Author) and Radulovic, et al. (2013) [...]

**Citation Report**  [Analyze Results](#) [Create Alert](#)

Refined By: [NOT Radulovic, NS et al. \(2013\)](#) [NOT Mitrovic, T et al. \(2014\)](#) [NOT Radulovic, NS et al. \(2015\)](#) [NOT Todossijevic, R et al. \(2016\)](#) [NOT Todossijevic, R et al. \(2017\)](#) [NOT Stojanovic, NM et al. \(2018\)](#) [NOT Djemic, A et al. \(2016\)](#) [NOT Radulovic, NS et al. \(2019\)](#) [NOT Radulovic, NS et al. \(2014\)](#) [NOT Radulovic, NS et al. \(2014\)](#) [NOT Radulovic, NS et al. \(2012\)](#) [NOT Mladenovic, D et al. \(2014\)](#) [NOT Radulovic, NS et al. \(2013\)](#) [NOT Radulovic, NS et al. \(2014\)](#) [NOT Mladenovic, M et al. \(2020\)](#) [NOT Mladenovic, MZ and Radulovic, NS \(2017\)](#) [NOT Djekic, BR et al. \(2019\)](#) [NOT Gencic, MS et al. \(2022\)](#) [NOT Andjelkovic, Z et al. \(2016\)](#) [NOT Mladenovic, M et al. \(2022\)](#) [NOT Banic, M et al. \(2022\)](#) [NOT Radulovic, NS et al. \(2017\)](#) [NOT Radulovic, NS et al. \(2021\)](#) [NOT Radulovic, NS et al. \(2020\)](#) [NOT Radulovic, NS et al. \(2022\)](#) [NOT Mladenovic, M et al. \(2017\)](#) [NOT Stojiljkovic, P et al. \(2017\)](#) [NOT Mladenovic, M et al. \(2019\)](#) [NOT Mladenovic, MZ and Radulovic, NS \(2019\)](#) [NOT Radulovic, NS et al. \(2020\)](#) [NOT Leinberger Jabari, A et al. \(2021\)](#) [NOT Stojanovic, NM et al. \(2022\)](#) [NOT Milovanovic, J et al. \(2021\)](#) [NOT Mladenovic, M et al. \(2015\)](#) [NOT Mladenovic, D et al. \(2015\)](#) [NOT Mladenovic, M et al. \(2015\)](#) [NOT Zhang, L et al. \(2018\)](#) [NOT Grcic, N et al. \(2018\)](#) [Clear all](#)

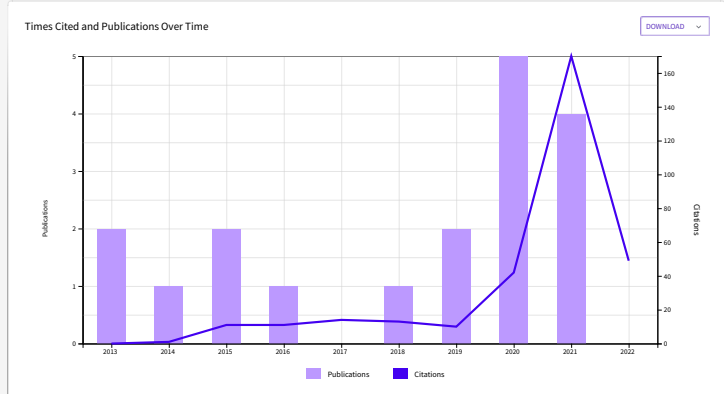
**Publications** **18** Total  
From 1900 to 2022

**Citing Articles** **259** Analyze  
**248** Analyze  
Without self-citations

**Times Cited** **321** Total  
**289** Without self-citations  
Average per item: **17.83**

**H-Index** **10**

[Export Full Report](#)



18 Publications	Sort by: Citations: highest first	Citations						Average per year	Total
		Citations							
		2018	2019	2020	2021	2022			
	Total	13	10	42	170	49	35.67	321	
1	Atomic-Level Microstructure of Efficient Formamidinium-Based Perovskite Solar Cells Stabilized by 5-Ammonium Valeric Acid Iodide Revealed by Multinuclear and Two-Dimensional Solid-State NMR <i>Alawati, AQ, Kubicki, D, G, Grazal, M</i> Nov 6 2019   JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 141 (44), pp.17659-17669	0	0	15	28	12	13.75	55	
2	Crown Ether Modulation Enables over 23% Efficient Formamidinium-Based Perovskite Solar Cells <i>Su, TS, Eickemeyer, FT, Grazal, M</i> Nov 25 2020   JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 142 (47), pp.19980-19991	0	0	0	43	10	17.67	53	
3	Guanine-Stabilized Formamidinium Lead Iodide Perovskites <i>Hong, L, Wu, J, G, Grazal, M</i> Mar 16 2020   F02-2020 (Early Access)   ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION 59 (12), pp.4691-4697	0	0	9	19	7	11.67	35	
4	Charge Carrier Localization and Transport in Organic Semiconductors: Insights from Atomistic Multiscale Simulations <i>Mladenovic, M and Vukmirovic, N</i> Apr 1 2015   ADVANCED FUNCTIONAL MATERIALS 25 (13), pp.1915-1922	6	4	2	4	2	4.13	33	
5	Formamidinium-Based Dion-Jacobson Layered Hybrid Perovskites: Structural Complexity and Optoelectronic Properties <i>Gelvez-Basada, MC, Abilaw, F, Grazal, M</i> Sep 20 2021   Jul 20 2020 (Early Access)   ADVANCED FUNCTIONAL MATERIALS 30 (38)	0	0	1	22	7	10	30	
6	Ruddlesden Popper Phases of Methylammonium-Based Two-Dimensional Perovskites with 5-Ammonium Valeric Acid AVA2[MA(n-1)Pb(n)](3n+1) with n=1, 2, and 3 <i>Ahadi, Asani, N, Jahanshahi, F, L, Bothschafter, U</i> Jul 4 2019   JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS 10 (13), pp.3543-3549	0	0	10	13	2	6.25	25	
7	Nanoscale Phase Segregation in Supramolecular pi-templating for Hybrid Perovskite Photovoltaics from NMR Crystallography <i>Hose, M, Nakamura, T, Emsley, L</i> Jan 27 2021   Jan 20 2021 (Early Access)   JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 143 (3), pp.1529-1538	0	0	0	18	3	10.5	21	
8	Electronic States at Low-Angle Grain Boundaries in Polycrystalline Naphthalene <i>Mladenovic, M, Vukmirovic, N and Stankovic, J</i> Aug 1 2013   JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 117 (30), pp.15741-15748	1	1	1	3	0	1.7	17	
9	Effects of thermal disorder on the electronic properties of ordered polymers <i>Mladenovic, M and Vukmirovic, N</i> 2014   PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 16 (47), pp.25950-25958	3	2	1	1	0	1.67	15	
10	Effects of thermal disorder on the electronic structure of halide perovskites: insights from MD simulations <i>Mladenovic, M and Vukmirovic, N</i> Oct 28 2018   PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 20 (48), pp.25693-25700	0	2	3	3	2	2	10	
11	Multimodal host-guest complexation for efficient and stable perovskite photovoltaics <i>Zhang, H, Eickemeyer, FT, Mladenovic, M</i> Jun 7 2021   NATURE COMMUNICATIONS 12 (1)	0	0	0	4	4	4	8	
12	Unravelling the structural complexity and photophysical properties of adamantyl-based layered hybrid perovskites <i>Jahanshahi, F, Mladenovic, M, Grazal, M</i> Sep 14 2020   JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY A 8 (34), pp.17732-17740	0	0	0	6	0	2	6	
13	Electronic States at the Interface between Crystalline and Amorphous Domains in Conjugated Polymers <i>Mladenovic, M and Vukmirovic, N</i> Oct 15 2015   JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 119 (41), pp.23329-23333	2	1	0	1	0	0.75	6	
14	Spontaneous Polarization Induced by Side Chains in Ordered Poly(3-hexylthiophene) <i>Mladenovic, M and Vukmirovic, N</i> Aug 25 2016   JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 120 (35), pp.1885-1890	1	0	0	2	0	0.43	3	
15	Organic Spacers in 2D Perovskites: General Trends and Structure-Property Relationships from Computational Studies <i>Jahanshahi, F, Mladenovic, M, L, Bothschafter, U</i> Apr 20 2021   Apr 20 2021 (Early Access)   MELUETICA CHIMICA ACTA 104 (4)	0	0	0	2	0	1	2	
16	Why choosing the right partner is important: stabilization of ternary Cs(y)GUA(x)FA(1-y-x)PbI(3) perovskites <i>Bozku, A, Mladenovic, M, L, Bothschafter, U</i> Sep 28 2020   PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 22 (36), pp.20880-20890	0	0	0	1	0	0.33	1	
17	Atomic and electronic structure of grain boundaries in crystalline organic semiconductors <i>Mladenovic, M, Vukmirovic, N and Stankovic, J</i> 3rd International Conference on the Physics of Optical Materials and Devices Nov 20 13   PHYSICA SCRIPTA T157	0	0	0	0	0	0.1	1	
18	Naphthalenediimide/Formamidinium-Based Low-Dimensional Perovskites <i>Mishra, A, Abilaw, F, Grazal, M</i> Aug 24 2021   Aug 20 2021 (Early Access)   CHEMISTRY OF MATERIALS 33 (16), pp.6412-6420	0	0	0	0	0	0	0	

## ПРИЛОГ 3

Докази о наградама



ИНСТИТУТ ЗА ФИЗИКУ			
ПРИМЛ. ЕНО: 24-04-2018			
Рад. јед.	б р о ј	Арх. шифра	Прилог
0801	598/1		

Научном већу Института за физику у Београду

### Извештај жирија за доделу Годишње награде за научни рад и Студентске награде Института за физику у Београду

#### 1) Годишња награда за научни рад

За Годишњу награду за научни рад Института за физику у Београду за 2018. годину предложена су три кандидата:

1. **др Ненад Врањеш**, виши научни сарадник - предлагачи: др Лидија Живковић, научни саветник, академик Ђорђе Шијачки, научни саветник у пензији;
2. **др Жељка Никитовић**, научни саветник - предлагачи: др Душан Арсенивић, научни саветник, др Владимир Стојановић, виши научни сарадник, др Зоран Распоповић, виши научни сарадник;
3. **др Невена Пуач**, научни саветник - предлагачи: академик Зоран Петровић, научни саветник, др Вељко Дмитрашиновић, научни саветник.

Након детаљне квалитативне и квантитативне анализе научног доприноса кандидата током претходне две календарске године, а посебно узимајући у обзир квалитет објављених радова и њихов импакт на научну област, односно проблематику којој припадају, стваралачки удео кандидата у оствареним резултатима, удео Института у оствареним резултатима, као и број радова и њихове категорије у смислу Правилника о поступку и начину вредновања, и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата Министарства надлежног за науку, **жири је донео једногласну одлуку да се Годишња награда за научни рад Института за физику у Београду за 2018. годину додели**

#### **др Ненаду Врањешу**

за значајан допринос мерењу масе  $W$  бозона на АТЛАС експерименту

#### Образложење:

Сви предложени кандидати имају импресиван научни опус и током претходне две календарске године су објавили нове и значајне резултате у међународним научним часописима и представили их на међународним конференцијама.



**Др Ненад Врањеш** се бавио мерењем параметара Стандардног модела на АТЛАС експерименту на Великом сударачу хадрона (ЛХЦ) у Церну. Као члан АТЛАС колаборације, др Врањеш је аутор на свим радовима колаборације, док је кључан допринос имао на четири рада М21 категорије, а сами резултати његовог рада су изузетно допринели објављивању још четири рада М21 категорије. Главна тема истраживања др Врањеша је било прецизно мерење масе  $W$  бозона. Ова мерења су кључна за проверу конзистентности Стандардног модела, а веће одступање од предвиђених вредности може да укаже на физику ван Стандардног модела. Теорија Стандардног модела предвиђа масу  $W$  бозона са прецизношћу од 8 MeV, а да би експериментални резултати били упоредиви потребно је достићи релативну прецизност од 0.01%. Др Врањеш је кључно допринео у неколико битних аспеката овог мерења: i) имплементирао је иновативне алгоритме и технике који су омогућили бољу калибрацију импулса миона, што је најкритичнија компонента овог истраживања, ii) имао је кључну улогу у мерењу ефикасности и тригровања миона, калибрацији хадронског узмака, одабиру интересантних догађаја, као и у целокупној анализи података у мионском каналу. Постигнута неодређеност од 19 MeV је најпрецизније мерење на експериментима у физици честица, а добијени резултат је у складу са најновијим теоријским предвиђањима. Др Ненад Врањеш био је коресподентни аутор на датом раду, а сам резултат је приказан на посебном семинару у Церну, свим конференцијама из области, а био је и предмет Церновог саопштења за медије које је пренесено у више других медија из различитих земаља. Иначе ово је прво и, за сада, једино објављено мерење масе  $W$  бозона на експериментима ЛХЦ-а. Додатно, др Врањеш је имао значајну улогу у објављивању резултата прецизног мерења топ кварка, као и у мерењу и калибрацији луминозности, где се резултати користе у већини радова АТЛАС експеримената. Због свог изузетног рада и доприноса, др Врањеш је међународно препознат и именован за руководиоца АТЛАС групе за анализу података са  $W$  и  $Z$  бозонима. Резултати др Врањеша у претходне две године представљају, не само значајан допринос најактуелнијим истраживањима у физици елементарних честица, већ и до сада вероватно најзначајнији допринос истраживача из наше земље у активностима Церн-ових колаборација.

**Др Жељка Никитовић** се бавила транспортом наелектрисаних честица у смешама основног гаса са радикалима, сударним процесима на високим  $E/N$ , као и прорачунима транспортних и брзинских коефицијената јона у неутралном гасу који су од интереса за моделовање ниско-температурских плазми које се користе у биомедицини. Потреба за базама података које би служиле за моделовање плазми за производњу интегрисаних кола и наноструктура нужно укључује позитивне јоне. Међутим, за позитивне јоне са великим рекомбинационим потенцијалом ситуација је потпуно различита. Егзотермне реакције, које уједно врше и промену идентитета посматраних јона, драстично мењају транспортне особине ових јона, а тиме и утичу на особине неравнотежних плазми којима доминирају судари у гасу. По први пут је у литератури приказано одређивање транспортних параметара јона у индукованом поларизационом потенцијалу, уз учешће егзотермних реакција асоцијације и реакција промене идентитета јона. У овим истраживањима др Никитовић је користила Монте Карло рачунарске симулације. Поред наведеног, предлагачи истичу допринос кандидаткиње везан за теоријску



анализу појаве *four wave mixing-a* у врућим парама калијума у пулсном режиму ласера при чему се користи модел заснован на Bloch-Maxwell једначинама уз узимање у обзир Доплеровог ефекта. У периоду од претходне две године кандидаткиња је објавила девет радова (M13:1 M21a:1, M21:2, M22: 2, M23:3, M24:1)

Др Невена Пуач се бави пројектовањем и дијагностиком неравнотежних плазми и њиховом применама у биологији, медицини и пољопривреди. Она је учествовала у развоју високо-напонских извора и појачавача неопходних за одржавање неравнотежних плазми на високом притиску. У дијагностици неравнотежне плазме, др Пуач је постигла значајне резултате, укључујући мерење снаге деривативним сондама, мерење параметара плазме Лангмуровим и каталитичким сондама и оптичком емисионом спектроскопијом. Током претходне две календарске године, др Невена Пуач је објавила укупно 9 радова у међународним часописима (M21a:1, M21:6, M23:2). Посебно се издвајају два рада из области примена неравнотежних плазми у пољопривреди и процесирању хране. Један од ових радова је написан по позиву и представља тзв. мишљење експерта (енгл. *expert opinion article*). Овај рад је привукао велику пажњу у заједници истраживача који се баве овом тематиком, јер је дефинисао будуће правце истраживања. Ово јасно показује да је др Невена Пуач један од лидера у својој области истраживачког рада чиме је значајно допринела порасту угледа Института за физику у свету. Други рад представља кулминацију вишегодишњег рада др Невене Пуач на разумевању механизма интеракције плазме и семена са циљем бржег клијања и раста биљака. У овом раду су анализрани ефекти третмана плазмом на физиологију семена на основу испитивања ензима одговорног за уклањање сигналног молекула  $H_2O_2$ . Научна активност др Невене Пуач је пример квалитетног и успешног мултидисциплинарног рада како са колегама у земљи тако и са колегама у иностранству. Она је остварила веома успешну сарадњу са Институтом за биолошка истраживања Синиша Станковић, Стоматолошким факултетом и Медицинским факултетом Универзитета у Београду, као и са колегама из Португалије, Словеније, Мађарске, Италије и Чешке.

#### Закључак:

На основу свега наведеног, иако су сва три кандидата дала значајне научне доприносе у свом раду током претходне две календарске године, два кандидата др Пуач и др Вранеш се посебно истичу у погледу квалитета постигнутих резултата и свом доприносу повећања међународног угледа Института за физику. Међутим, резултати др Врањеша у претходне две године представљају, не само значајан допринос најактуелнијим истраживањима у физици елементарних честица, већ и до сада вероватно најзначајнији допринос истраживача из наше земље у активностима Цернових колаборација. Имајући ово у виду **сматрамо да се научни резултати др Ненада Врањеша посебно истичу по свом изузетном квалитету и значају, да доприносе повећању међународног угледа Института за физику, и да због тога Годишњу награду за научни рад Института за физику за 2018. годину треба доделити др Ненаду Врањешу.**



## II) Студентска награда

За Студентску награду Института за физику у Београду за 2017. годину предложено је седам кандидата:

1. **др Маријана Гавриловић Божовић**, истраживач сарадник - предлагач: др Соња Јовићевић, научни саветник у пензији;
2. **др Владимир Лончар**, истраживач сарадник - предлагач: др Антун Балаж, научни саветник;
3. **др Срђан Марјановић**, истраживач сарадник - предлагач: академик Зоран Петровић, научни саветник;
4. **др Марко Младеновић**, научни сарадник - предлагач: др Ненад Вукмировић, научни саветник;
5. **др Јелена Пешић**, истраживач сарадник - предлагач: др Радош Гајић, научни саветник;
6. **др Урош Ралевић**, истраживач сарадник - предлагач: др Горан Исић, научни сарадник;
7. **др Јелена Смиљанић**, истраживач сарадник - предлагач: др Марија Митровић Данкулов, научни сарадник.

Након детаљне анализе докторских дисертација и научних доприноса кандидата, а посебно узимајући у обзир квалитет дисертација и објављених радова и њихов импакт на научну област, односно проблематику којој припадају, стваралачки удео кандидата у оствареним резултатима, удео Института у оствареним резултатима, као и број радова и њихове категорије у смислу Правилника о поступку и начину вредновања, и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата Министарства надлежног за науку, жири је донео једногласну одлуку да се **Студентска награда Института за физику у Београду за 2017. годину додели**

### **др Марку Младеновићу**

за докторску дисертацију под називом *“Електронска својства органских полупроводника на границама домена”*.

#### Образложење:

Жири констатује да су докторске дисертације свих предложених кандидата изузетно високог квалитета. Сви кандидати имају значајан број објављених радова у квалитетним међународним часописима, а своје резултате су представили на бројним међународним и домаћим конференцијама.

**Др Маријана Гавриловић Божовић** је докторску дисертацију под називом *Узајамно дејство кавитационог мехура и зрачења плазме код пробоја индукованог једним*





ласерским импулсом на мети у течности одбранила на Електротехничком факултету Универзитета у Београду, под руководством проф. др Јована Цветића. Она је у својој дисертацији проучавала развој кавитационог мехура, појаву ударних таласа и зрачење ласерски индуковане плазме у течной средини. У истраживању плазме је коришћена техника брзе фотографије и оптичка емисиона спектроскопија, ударни таласи су анализирани помоћу шлирен методе, а еволуција кавитационог мехура је проучавана шадографијом и техником пробног снопа. У току израде докторске дисертације је објавила 9 радова у међународним часописима (M21a:1, M21:5, M23:3).

Др Владимир Лончар је докторску дисертацију под називом *Hybrid Parallel Algorithms for Solving Nonlinear Schrodinger Equation* одбранио на Природно-математичком факултету Универзитета у Новом Саду, под руководством др Антуна Балажа. У својој дисертацији он се бавио развојем паралелних алгоритама за решавање једног облика Грос-Питаевски једначина који се извршавају на графичком процесору, на вишејезгарним процесорима, као и на системима са дистрибуираном меморијом односно рачунарским кластерима. У току израде докторске дисертације др Лончар је објавио четири рада у међународним часописима (M13: 1, M21a:3).

Др Срђан Марјановић је докторску дисертацију под називом *Монте Карло симулација транспорта позитрона у реалним системима испуњеним гасом* одбранио на Електротехничком факултету Универзитета у Београду, под руководством академика др Зорана Љ. Петровића. Др Срђан Марјановић је у својој дисертацији у Монте Карло симулацијама разматрао реалне системе и уређаје испуњене гасом који своју функцију базирају на елементарним сударним и транспортним процесима позитрона. Највећу пажњу је посветио разматрању позитронског трапа, компресије снопа позитрона ротирајућим електричним пољем и термализације позитрона у биолошки релевантним срединама. У току израде докторске дисертације, др Срђан Марјановић је објавио 15 радова у међународним часописима (M21a:3, M21:7, M22:4, M23:1).

Др Марко Младеновић је докторску дисертацију под називом *Electronic Properties of Interfaces between Domains in Organic Superconductors* (Електронска својства органских полупроводника на границама домена) одбранио на Електротехничком факултету Универзитета у Београду, под руководством др Ненада Вукмировића. У својој дисертацији, он се бавио проучавањем проблема граница између домена у органским полупроводницима, т.ј. материјалима који су због своје лаке и једноставне производње од великог значаја за примене у индустрији, а са друге стране слабо проучени због њихове комплексне структуре. У току израде докторске дисертације, која је трајала четири године, и која је представљала једно од првих теоријских истраживања која разматрају овај проблем, др Марко Младеновић је (као први аутор) објавио 7 радова у међународним часописима (M21a:2, M21:3, M22:1, M24:1).

Др Јелена Пешњ је докторску дисертацију под називом *Investigation of Superconductivity in Graphene and Related Materials Based on Ab-initio Methods* (Истраживање суперпроводности у графену и сличним материјалима коришћењем ab-



*initio* метода) која је рађена под менторством др Радоша Гајића. Фокус истраживања је на електрон-фононоској интеракцији у овим материјалима и појави суперпроводности. У току израде докторске дисертације Др Пешић је објавила 8 радова у међународним часописима (M21a:2, M21:3, M22:3).

Др Урош Ралевић је докторску дисертацију под називом Наноскопија и примене дводимензионалних и квази дводимензионалних система (енг. "*Nanoscopy and applications of two-dimensional and quasi-two-dimensional systems*") одбранио на Електротехничком факултету Универзитета у Београду, под менторством др Горана Исића. Кандидат се бавио испитивањем електронских и оптичких особина дводимензионалних материјала попут графена и монослојева молибден дисулфида, слојевитих материјала попут церијум трителурида и металних наночестица и њихових кластера. У току израде докторске дисертације Др Ралевић је објавио 16 радова у међународним часописима.

Др Јелена Смиљанић је докторску дисертацију под називом *Испитивање својстава комплексних мрежа са дискретном динамиком* одбранила на Електротехничком факултету Универзитета у Београду, под менторством др Марије Митровић Данкулов. Фокус истраживања је био на анализи динамичких процеса, структуре мреже интеракција, као и њиховог међусобног утицаја у социјалним системима који подразумевају непосредну комуникацију. У току израде докторске дисертације Др Смиљанић је објавила 5 радова у међународним часописима (M21a:1, M21:2, M22:1, M13:1).

#### **Закључак:**

Имајући у виду разноликост истраживачких тема и области, разнородност доприноса кандидата, као и квалитет докторских дисертација и радова проистеклих из њих, било је изузетно тешко одабрати добитника овогодишње Студентске награде. Ипак, **жири је одлучио да награду додели др Марку Младеновићу**, због изузетно квалитетног истраживања које омогућава разумевање електронских особина граница између домена у огранским полупроводницима, а које је урадио у изузетно кратком временском року. Поред тога, посебно желимо да истакнемо и дисертацију др Срђана Марјановића која је урађена у нешто дужем року року, али представља систематичан и изузетно значајан допринос моделовању и даљем развоју позитронских трапова испуњених гасом.

На крају бисмо поново желели да истакнемо да су све овогодишње докторске дисертације високог квалитета и да то видимо као велики успех предложених кандидата, њихових ментора, као и Института за физику у Београду.

Надамо се још јачој и бројнијој конкуренцији следеће године и свим кандидатима честитамо на извршним научним резултатима, а добитницима на освојеним наградама.

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ  
ИНСТИТУТ ЗА ФИЗИКУ БЕОГРАД

Прегревица 118, 11080 Земун - Београд, Србија  
Телефон: +381 11 3713000, Факс: +381 11 3162190, www.ipb.ac.rs  
ПИБ: 100105980, Матични број: 07018029, Текући рачун: 205-66984-23



Београд, 24. април 2018. год.

A handwritten signature in blue ink, appearing to read 'Borjević M.'.

др Магдалена Борђевић  
научни саветник, Институт за физику у Београду

A handwritten signature in blue ink, appearing to read 'Sasa Dujko'.

др Саша Дујко  
научни саветник, Институт за физику у Београду

A handwritten signature in blue ink, appearing to read 'Šuvačević M.'.

др Милован Шуваков  
виши научни сарадник, Институт за физику у Београду

# EUROPEAN MATERIALS RESEARCH SOCIETY YOUNG SCIENTIST AWARD

presented to

*Marko Mladenovic*

in recognition of an outstanding paper contributed to the  
2014 E-MRS SPRING MEETING

Symposium O

Computational Modelling of Organic Semiconductors:  
from the Quantum World to Actual Devices

Thomas Lippert  
President



Lille, France • 26<sup>th</sup> – 30<sup>th</sup> May, 2014

Paul Siffert  
General Secretary



Poštovani kolega,

Imam zadovoljstvo da vas obavestim da ste vi dobitnik nagrade za mladog istraživača na sekciji za Mikroelektroniku i optoelektroniku. Ovo je za sada nezvanična informacija koju vam šaljem zbog vašeg upita, a zvanično obaveštenje dobićete za nekoliko dana, zajedno sa pojedinostima vezanim za dodeljivanje nagrade.

Srdačan pozdrav,  
Zoran Jakšić,  
Predsednik Programskog odbora ETRAN-a

Dr. Zoran Jaksic, dipl.-ing. EE, Science Director  
Principal Research Fellow/Full Research Professor  
Centre of Microelectronic Technologies and Single Crystals  
Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy  
University of Belgrade  
Njegoseva 12, 11000 Belgrade, Serbia

Phone [REDACTED], Mobile [REDACTED], Fax [REDACTED]

## ПРИЛОГ 4

Докази о ангажманима кандидата у формирању научних кадрова

# Interfacial Effects in Hybrid Perovskite Solar Cells : Insights from First Principles Studies

Présentée le 18 juin 2021

Faculté des sciences de base  
Laboratoire de chimie et biochimie computationnelles  
Programme doctoral en chimie et génie chimique

pour l'obtention du grade de Docteur ès Sciences

par

**Farzaneh JAHANBAKHSI**

Acceptée sur proposition du jury

Prof. B. Smit, président du jury  
Prof. U. Röthlisberger, directrice de thèse  
Prof. G. Galli, rapporteuse  
Prof. C. Stoumpos, rapporteur  
Prof. R. Buonsanti, rapporteuse

# Acknowledgements

*This is an end to five indispensable years  
Filled with invaluable gains and irreplaceable losses,  
Bursting with screams of joy and tears of sorrow,  
This very moment,  
Is where I shall start again  
...for this is the end*

First and foremost, I would like to express my sincerest appreciation to my advisor, *Prof. Ursula Röthlisberger*. Her unconditional support since day one, not only throughout my research but also in my personal well being, has set the bar so high that words fall short to do her justice. I might as well abide by saying "Thank you for the genuine human being that you are and for all you have done for me". I would also like to especially thank the esteemed jury members of my doctoral oral exam, Prof. Berend Smit, Prof. Giulia Galli, Prof. Constantinos Stoumpos and Prof. Raffaella Buonsanti who I am deeply honored to have in my thesis defense session.

Dozens of people have paved my way throughout this journey without whom this very day would not have come. Five years at LCBC gave me the opportunity to witness tens of individuals joining, befriending, making carriers and leaving, which requires a trip down memory lane to name them all. I remain humbly appreciative to every single person who I have come in contact with during my stay at LCBC, particularly, the one and only Karin who will always be near and dear to my heart and my fellow nerd *Marko* with whom I shared tons of memories, uphill and downhill, and I could not be more blessed that our co-workship has turned into an authentic friendship. I would also like to express my especial thanks to all the collaborators in the group of Prof. Michael Grätzel. Outside the LCBC members, I had few genuine friends who I spent the least yet the most quality time with, from my first ever trip to Lausanne to this very day. *Ali and Vahid*, you belong in the brightest spots of my memory. Five years ago, I left my home town to fulfil the mutual dream of mine and my Dad's, my biggest cheer leader, my everlasting soul mate, whose last words whispered into my ears were "I believe in you more



## Acknowledgements

---

than I believe in myself." before he lost an unfair year-long battle to cancer. This very moment, I cannot say for certain he has left us in immense shock and is no longer with us, embraced by all his vivid memories and all his inspiring words heard deep in the stillness. *I forever, cherish all you gave me Dad and will always love you to the moon and back.*

*Mom and Ali*, my only family members and relatives, I remain endlessly beholden for having you, even thousands of miles away. I could not have been more blessed and indebted to all the sacrifices you made, my adored Mom, and I pray that you live long and blissfully. And you, my beloved brother, my partner in crime, I am forever filled with gratitude that you have always been there for me and that you are the living memory of Dad.

*May tomorrow be a better day..*

Lausanne, May 2021

EJB

MASTER THESIS

---

Ab initio modelling of the electro-optical properties of  
barium titanate

---

BY

VIRGINIE DE MESTRAL

SUPERVISED BY

*Supervisor:*

PROF. ANNA FONTCUBERTA I  
MORRAL

*Expert:*

PROF. MATHIEU LUISIER

*Daily supervisor:*

DR. MARKO MLADENOVIC

**EPFL**

**ETH** zürich

Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne  
*Department of Material Science and  
Engineering*

Eidgenössische Technische Hochschule Zürich  
*Department of Electrical Engineering and  
Information Technology*

Zürich, 1<sup>st</sup> April 2022

## Acknowledgements

First and foremost, I would like to deeply thank my Master Thesis supervisors Prof. Mathieu Luisier and Dr. Marko Mladenovic for their valuable guidance, their support and the very many formal as well as informal creative and insightful conversations that we shared about this project. Likewise, my warmest thanks go to Prof. Anna Fontcuberta i Morral at EPFL for accepting to act as official supervisor of my Master Thesis. I also feel very grateful toward Dr. Jean Fompeyrine,

Dr. Timo Schumann and the whole Lumiphase Corporation team for having entrusted me to work along their side. Furthermore, I would like to express my gratitude to Prof. Nicola Marzari and Dr. Michele Kotiuga for sharing their research about the structural prototype of tetragonal

BTO, Prof. Philippe Ghosez for unravelling the detailed calculations of the Pockels tensor in Abinit and Dr. Andrea Urru for helping me uncover the code symmetry recognition procedures.

This work was done in collaboration with the Lumiphase Corporation, Zürich, and was supported by a MARVEL INSPIRE Potentials Master's Fellowship



This research was supported by the NCCR MARVEL, a National Centre for Competence in Research, funded by the Swiss National Science Foundation (grant number 182892).

## ПРИЛОГ 5

Докази о руковођењу пројектним задацима



0801 Број 478/1  
Датум 04. 05. 2022

## ПОТВРДА О РУКОВОЂЕЊУ ПРОЈЕКТНИМ ЗАДАТКОМ

Овим потврђујем да је научни сарадник **др Марко Младеновић**, за кога се покреће избор у звање виши научни сарадник, у оквиру пројекта основних истраживања „Моделирање и нумеричке симулације сложених вишечестичних система“ (ОН171017), руководио пројектним задатком: „Испитивање ефекта термалног неуређења на електронске особине перовскита на бази халогених елемената“ од августа 2016. до јуна 2017. године. На поменутом задатку су били ангажовани следећи истраживачи: др Марко Младеновић, др Ненад Вукмировић, Милан Јоцић.

др Антун Балаж  
научни саветник  
руководилац пројекта ОН171017

To whom it may concern,

I hereby certify that Dr Marko Mladenović, born on September 2<sup>nd</sup>, 1988, worked as a postdoctoral fellow in my research group from March 15<sup>th</sup>, 2017 to March 14<sup>th</sup>, 2021 at the Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), Institut des Sciences et Ingénierie Chimiques (ISIC), Laboratoire de Chimie et Biochimie Computationnelles (LCBC).

During this period, Dr. Mladenović participated in the following projects:

1. From March 15<sup>th</sup>, 2017 to May 14<sup>th</sup>, 2017, he participated in the “NCCR MUST - Molecular Ultrafast Science and Technology”, funded by the Swiss National Science Foundation. Within the framework of this project, Dr. Mladenović was in charge of the following tasks:
  - Processing of the research project “NCCR MUST - Molecular Ultrafast Science and Technology”, according to the project application/plan and grant regulations.
  - Dr. Mladenović reported directly to the head of the research project, Prof. Ursula Röthlisberger.
2. From May 15<sup>th</sup>, 2017 to January 31<sup>st</sup>, 2018, he participated in the “NCCR MARVEL- Materials’ Revolution: Computational Design and Discovery of Novel Materials”, funded by the Swiss National Science Foundation. While working on this project, Dr. Mladenović was in charge of the following tasks:
  - Processing of the research project “NCCR MARVEL- Materials’ Revolution: Computational Design and Discovery of Novel Materials”, according to the project application/plan and grant regulations.
  - Dr. Mladenović reported directly to the head of the research project, Prof. Ursula Röthlisberger.
3. From February 1<sup>st</sup>, 2018 to December 31<sup>st</sup>, 2019, he participated in the “EPISODE: Engineering of advanced hybrid Perovskite for Integration with Silicon photovoltaic Optoelectronic DEvice”, funded by the Swiss National Science Foundation. Within the framework of this project, Dr. Mladenović was in charge of the following tasks:
  - Processing of the research project “EPISODE: Engineering of advanced hybrid Perovskite for Integration with Silicon photovoltaic Optoelectronic DEvice”, according to the project application/plan and grant regulations.
  - Dr. Mladenović reported directly to the head of the research project, Prof. Ursula Röthlisberger.

From January 1<sup>st</sup>, 2019 to March 14<sup>th</sup>, 2021, Dr. Mladenović was funded by the EPFL Dotation grant. During his postdoctoral stay in my group, he published 11 journal articles, which are listed in Appendix A.

Lausanne, May 18<sup>th</sup>, 2022



Prof. Ursula Röthlisberger

## Appendix A

### List of publications of Dr. Marko Mladenović completed at the Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne

- N. Ashari Astani, F. Jahanbakhshi, M. Mladenović, A. Q. M. Alanazi, I. Ahmadabadi, M. R. Ejtehadi, M. I. Dar, M. Grätzel, U. Rothlisberger: “Ruddlesden-Popper Phases of Methylammonium-based 2D Perovskites with 5-Ammonium Valeric Acid  $\text{AVA}_2\text{MA}_{n-1}\text{Pb}_n\text{I}_{3n+1}$  with  $n=1, 2$  and  $3$ ”, *J. Phys. Chem. Lett* **10** (2019) 3543-3549
- A. Alanazi, D. J. Kubicki, D. Prochowitz, E. Alharbi, M. Bouduban, F. Jahanbakhshi, M. Mladenović, J. V. Milić, F. Gioradano, D. Ren, et al “Atomic-Level Microstructure of Efficient Formamidinium-Based Perovskite Solar Cells Stabilized by 5-Ammonium Valeric Acid Iodide Revealed by Multi-Nuclear and Two-Dimensional Solid-State NMR”, *J. Amer. Chem. Soc.* **141** (2019) 17659-17669
- L. Hong, J. V. Milić, P. Ahlawat, M. Mladenović, F. Jahanbakhshi, D. J. Kubicki, D. Ren, A. Ummadasingu, Y. Li, C. Tian, et al “Guanine-Stabilized Formamidinium Lead Iodide Perovskites”, *Angewandte Chemie International Edition* **59** (2020), 4691-4697
- M. G.-Rueda, P. Ahlawat, L. Merten, F. Jahanbakhshi, M. Mladenović, A. Hinderhofer, M. I. Dar, Y. Li, A. Dučinskas, B. Carlson, et al “Formamidinium-Based Dion-Jacobson Layered Hybrid Perovskites: Structural Complexity and Optoelectronic Properties”, *Adv. Funct. Mater* (2020), 2003428
- F. Jahanbakhshi, M. Mladenović, L. Merten, M. G.-Rueda, P. Ahlawat, Y. Li, A. Hinderhoffer, M. I. Dar, W. Tress, B. Carlson, et al “Unravelling Structural and Photophysical Properties of Adamantyl-Based Layered Hybrid Perovskites”, *J. Mat. Chem. A* **8** (2020) 17732-17740
- A. Boziki, M. Mladenović, M. Grätzel, U. Rothlisberger: “Why Choosing the Right Partner is Important: Stabilization of Ternary  $\text{Cs}_y\text{GUA}_x\text{FA}_{(1-y-x)}\text{PbI}_3$  Perovskites”, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22** (2020) 20880-20890
- T.-S. Su, H. Zhang, F. T. Eickemeyer, F. Jahanbakhshi, M. Mladenović, J. Li, J. V. Milić, J. H. Yum, K. Sivula, O. Ouellete et al, “Crown Ether Modulation Enables over 23% Efficient Formamidinium-based Perovskite Solar Cells”, *J. Amer. Chem. Soc* **142** (2020) 19980–19991
- M. Hope, T. Nakamura, P. Ahlawat, A. Mishra, M. Cordova, F. Jahanbakhshi, M. Mladenović, R. Runjun, B. Carlsen, D. Kubicki et al, “Nanoscale Phase Segregation in Supramolecular  $\pi$ -Templating for Hybrid Perovskite Photovoltaics from NMR Crystallography”, *J. Amer. Chem. Soc* **143** (2021), 1529–1538
- H. Zhang, F. T. Eickemeyer, Z. Zhou, M. Mladenović, F. Jahanbakhshi, O. Ouellete, A. Hinderhoffer, L. Merten, M. Hope, A. Mishra et al, “Multimodal Host–Guest Complexation for Efficient and Stable Perovskite Photovoltaics”, *Nat. Commun* **12**, (2021) 3383
- F. Jahanbakhshi, M. Mladenović, M. Dankl, A. Boziki, P. Ahlawat, U. Rothlisberger “Organic Spacers in 2D Perovskites: General Trends and Structure-Property Relationships from Computational Studies”, *Helv. Chim. Acta* **104** (2021), e2000232
- A. Mishra, P. Ahlawat, G. C. Fish, F. Jahanbakhshi, M. Mladenović, M. Almalki, M. A.-R. Preciado, M. C. G.-Rueda, D. J. Kubicki, P. A. Schouwink, V. Dufoulon et al, “Naphthalenediimide/Formamidinium-Based Low-Dimensional Perovskites”, *Chem. Matter* **33** (2021) 6412-6420

## ПРИЛОГ 6

Докази о рецензији и учешћу у организационом комитету научног скупа



[Conference Schedule](#)[Book of Abstracts](#)[Home](#)[Topics](#)[Committees](#)[Invited Speakers](#)[Program](#)[Abstract Submission](#)[Registration](#)[Special Announcements](#)[SFKM Charter Winners](#)[Conference Events](#)[Local Information](#)[Contact](#)

### Related Conferences

**Photonica 2015**,  
Belgrade, Serbia,  
24-28 August 2015

**YUCOMAT 2015**,  
Herceg-Novi, Montenegro,  
31 Aug - 4 Sept 2015

### Conference Chair

- Leonardo Golubović, West Virginia University

### Co-Chairs

- Antun Balaž, Institute of Physics Belgrade
- Igor Herbut, Simon Fraser University
- Mihajlo Vanević, Faculty of Physics Belgrade
- Nenad Vukmirović, Institute of Physics Belgrade

### Organizing Committee

- Antun Balaž, Institute of Physics Belgrade
- Edib Dobardžić, Faculty of Physics Belgrade
- Marko Mladenović, Institute of Physics Belgrade
- Jovana Petrović, Vinča Institute of Nuclear Sciences
- Mihajlo Vanević, Faculty of Physics Belgrade
- Vladimir Veljić, Institute of Physics Belgrade
- Nenad Vukmirović, Institute of Physics Belgrade

### Program Committee

- Zoran Radović (Chair), Faculty of Physics Belgrade
- Nataša Bibić, Vinča Institute of Nuclear Sciences
- Ivan Božović, Brookhaven National Laboratory
- Milan Damjanović, Faculty of Physics Belgrade
- Vladimir Dobrosavljević, Florida State University
- Laszlo Forro, EPFL Lausanne
- Gyula Eres, Oak Ridge National Laboratory
- Radoš Gajić, Institute of Physics Belgrade
- Zoran Hadžibabić, Cambridge University
- Igor Herbut, Simon Fraser University
- Zoran Ikonić, University of Leeds
- Darko Kapor, Department of Physics, University of Novi Sad
- Irena Knežević, University of Wisconsin Madison
- Milan Knežević, Faculty of Physics Belgrade
- Miodrag Kulić, Goethe-Universität Frankfurt
- Milica Milovanović, Institute of Physics Belgrade
- Ivanka Milošević, Faculty of Physics Belgrade
- Branislav Nikolić, University of Delaware
- Čedomir Petrović, Brookhaven National Laboratory
- Zoran Popović, Institute of Physics Belgrade
- Velimir Radmilović, Faculty of Technology and Metallurgy Belgrade
- Mijlko Satarić, Faculty of Technical Sciences Novi Sad
- Vojislav Spasojević, Vinča Institute of Nuclear Sciences
- Bosiljka Tadić, Jožef Štefan Institute Ljubljana
- Milan Tadić, School of Electrical Engineering Belgrade
- Filip Vukajlović, Vinča Institute of Nuclear Sciences

22-Jun-2016

Dear Mr Mladenovic:

TITLE: [REDACTED]

AUTHORS: [REDACTED]

(See below for abstract and previous reviewer reports)

I invite you to re-review this revised manuscript, which has been submitted for publication in Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP). Based on the previous reviewer reports the authors were asked to revise their manuscript and have now submitted a new version for publication in PCCP, published by the Royal Society of Chemistry.

Please advise whether your original concerns, and those of the other reviewers (reports copied below), have been satisfactorily addressed and whether this work is now suitable for publication in PCCP. Thank you in advance for taking the time to look at this work again.

At PCCP we aim to provide a rapid service for our authors. Therefore, please respond to this invitation by clicking on the appropriate link below within 3 days of receiving this email, and provide your report within 10 days of agreeing (7 days for communications and 14 days for reviews). If you need longer to provide your report please let me know. If you are unable to review at this time, I would be grateful if you could recommend another expert reviewer.

Once you accept the invitation to review this manuscript, you will receive a second email giving you access to the manuscript and our reviewer guidelines.

-----  
Please note that:

- your anonymity as a reviewer will be strictly preserved;
- you have the responsibility to treat the manuscript and any communications on the manuscript as confidential;
- the manuscript (or its existence) should not be shown to, disclosed to, or discussed with others, except in special cases, where specific scientific advice may be sought. In this event, please contact me with the names of those you have consulted;
- you should contact me immediately to report any conflict of interest, or suspicion of duplicate publication, fabrication of data or plagiarism.

Thank you for your support as a reviewer for the Royal Society of Chemistry. By providing a review for Physical Chemistry Chemical Physics you are part of the world's leading chemistry community.

Yours sincerely,

Prof. Gaoquan Shi  
Associate Editor  
Physical Chemistry Chemical Physics

## ПРИЛОГ 7

Позивно писмо за предавање по позиву



## VI International School and Conference on Photonics

Belgrade, Serbia, August 28<sup>th</sup> – September 1<sup>st</sup>, 2017

Institute of Physics Belgrade, Pregrevica 118, 11080 Belgrade, Serbia  
Phone: +381 11 3713 000; Fax: +381 11 3162 190, E-mail: [photonica2017@ipb.ac.rs](mailto:photonica2017@ipb.ac.rs), [www.photonica.ac.rs](http://www.photonica.ac.rs)

---

Dr. Marko Mladenović,  
Institute of Physics, University of Belgrade, Serbia

Belgrade, April 11<sup>th</sup>, 2017

Dear Dr. Mladenović,

On behalf of the Organizing Committee of the International School and Conference on Photonics, we are pleased to invite you to the **PHOTONICA2017** conference scheduled from **August 28<sup>th</sup>** till **September 1<sup>st</sup> 2017** in **Belgrade, Serbia**. This conference will be organized by the Institute of Physics Belgrade, Belgrade, Serbia, Optical Society of Serbia and Serbian Academy of Sciences and Arts.

It is our special pleasure to invite you to attend the meeting and present a **progress report lecture (20 min)**. The lecture is expected to contain a review and up-to-date progress in the specific field.

We would be honored if you could accept this invitation and accordingly send us a title of your lecture by April 30<sup>th</sup>, to be included in the Conference Announcement. The abstract of the lecture, 1 page in length, should be submitted at the conference website by May, 31<sup>st</sup>.

Kindly, as a progress report speaker, the Organizers will cover a half of your conference fee.

Should you have any question please don't hesitate to contact us by e-mail, telephone, mail or fax.

Yours sincerely

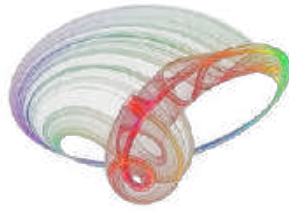
Aleksandar Krmpot  
(Chair of the Organizing Committee)

phone: +381 11 3713 012  
fax: +381 11 3162 190  
cell: +381 64 202 65 62  
e-mail: [krmpot@ipb.ac.rs](mailto:krmpot@ipb.ac.rs)  
[photonica2017@ipb.ac.rs](mailto:photonica2017@ipb.ac.rs)

## ПРИЛОГ 8

Апстракти конференцијских саопштења М32 и М34 категорије

# Book of abstracts



## PHOTONICA2017

The Sixth International School and Conference on Photonics

& COST actions: MP1406 and MP1402



&H2020-MSCA-RISE-2015 CARDIALLY workshop



28 August – 1 September 2017

Belgrade, Serbia

*Editors*

Marina Lekić and Aleksandar Krmpot

Institute of Physics Belgrade, Serbia

Belgrade, 2017

## Electronic Properties of Interfaces between Domains in Organic Semiconductors

M. Mladenovic<sup>1,2</sup> and N. Vukmirovic<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Chemical Sciences and Engineering,  
École polytechnique fédérale de Lausanne,  
Lausanne, Switzerland*

<sup>2</sup>*Institute of Physics Belgrade,  
Belgrade, Serbia*

e-mail: marko.mladenovic@epfl.ch

The aim of this thesis is to provide a link between atomic and electronic structure of different types of interfaces between domains in organic semiconductors. In polycrystalline small-molecule organic semiconductors interfaces are formed between single crystalline domains. We found that grain boundaries in polycrystalline naphthalene introduce trap states within the band gap of the material [1,2]. Trap states are localized on closely spaced pairs of molecules from opposite sides of the boundary. Realistic conjugated polymers, such as poly(3-hexylthiophene) (P3HT), contain mixed crystalline and amorphous domains. We found that HOMO state of the interface between crystalline and amorphous domain in P3HT belongs to crystalline domains [3]. States that belong to both domains and trap states were not found. Effects of thermal disorder are important in realistic conjugated polymers. Our results show that disorder in backbone chains of P3HT has strong effect on the electronic structure and leads to the localization of the wave functions of the highest states in the valence band, similar to the ones that occur in amorphous polymers [2,4]. At the interfaces between two materials in organic electronic devices, effects of spontaneous polarization in one or both of them on electronic properties can be pronounced. We show that ordered P3HT exhibits spontaneous polarization along the backbone direction, which is caused by the lack of inversion symmetry due to head-to-tail side chains arrangement [5]. We additionally show that spontaneous polarization in ordered P3HT keeps significant values even at room temperature when the effects of thermal disorder are important.

### REFERENCES

- [1] M. Mladenovic, N. Vukmirovic, I. E. Stankovic, *J. Phys. Chem C.* 117, 15741 (2013).
- [2] M. Mladenovic, N. Vukmirovic, *Adv. Funct. Mater.* 25, 1915 (2015).
- [3] M. Mladenovic, N. Vukmirovic, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 16, 25950 (2014).
- [4] M. Mladenovic, N. Vukmirovic, *J. Phys. Chem C.* 119, 23329 (2015).
- [5] M. Mladenovic, N. Vukmirovic, *J. Phys. Chem C.* 120, 18895 (2016).

- 16:00 - 16:30 **Coffee Break**
- 16:30 - 16:45 Hernan Miguez (*Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla (ICMS-CSIC)*), Miguel Anaya, Mauricio Calvo, Juan Galisteo, Juan Pedro Espinos  
B1-O4 Origin of Light Induced Ion Migration in Organic Metal Halide Perovskites in the Presence of Oxygen
- 16:45 - 17:00 Robert Westbrook (*Imperial College London, Department of Chemistry and Centre for Plastic Electronics*), Jose Marin-Beloqui, Irene Sanchez-Molina, Hugo Bronstein, Saif Haque  
B1-O5 Illuminating Charge-Transfer at the Absorber/Hole Transport Material Interface in Perovskite Solar Cells
- 17:00 - 17:15
- 17:15 - 17:30

**Session C1**

Chair: Dieter Neher  
Room: Theory

- 14:30 - 15:00 Ardalan Armin (*Department of Physics, Swansea University, Single Park, Swansea SA2 8PP, United Kingdoms*)  
C1-IS1 Shockley-type versus Transport-limited Organic Solar Cell
- 15:00 - 15:15 Eline Hutter (*Department of Chemical Engineering, Delft University of Technology, 2629 HZ Delft, The Netherlands.*), Rebecca Sutton, Yinghong Hu, Michiel Petrus, Pablo Docampo, Samuel Stranks, Henry Snaith, Tom Savenije  
C1-O1 The Role of the Monovalent Cation on the Recombination Kinetics in Lead Iodide Perovskites
- 15:15 - 15:30 Juan A. Anta, Jesus Idígoras, Lidia Contreras-Bernal (*Departamento de Sistemas Físicos, Químicos y Naturales, A&#769;rea de Química Física, Universidad Pablo de Olavide*), Antonio Riquelme, Susana Ramos-Terrón  
C1-O2 Small perturbation analysis of perovskite solar cells: feature extraction and modelling
- 15:30 - 15:45 Alessio Gagliardi, Ajay Singh, Waldemar Kaiser (*Technische Universitaet Muenchen*)  
C1-O3 Simulation of ion migration in perovskite solar cells using a kinetic Monte Carlo/drift diffusion numerical model and analysis of the impact on device performance
- 15:45 - 16:00 Gregory Kozyreff (*Université libre de Bruxelles*), Marina Mariano-Juste, Jorge Bravo-Abad, Guillermo Martinez-Denegri, Jordi Martorell  
C1-O4 Light trapping by intermittent chaos in a Photonic Fiber Plate
- 16:00 - 16:30 **Coffee Break**
- 16:30 - 16:45 Sebastian Müller (*School of Mathematics, University of Bristol, Bristol BS8 1TW, UK*)  
C1-O5 Continuum limit of the Gaussian disorder model for organic solar cells
- 16:45 - 17:00 Juan F. Galisteo-López (*Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla (ICMS-CSIC)*), Alberto Jiménez-Solano, Hernán Míguez  
C1-O6 Absorption and emission of light in optoelectronic nanomaterials: the role of the local optical environment
- 17:00 - 17:15 Pascal Kaienburg (*IEK5-Photovoltaics, Forschungszentrum Jülich, 52425 Jülich, Germany*), Paula Hartnagel, Bart E. Pieters, David Grabowski, Jiaoxian Yu, Thomas Kirchartz  
C1-O7 Impact of Non-linear Shunts from Pinholes on Device Performance
- 17:15 - 17:30 Marko Mladenovic (*Laboratory of Computational Chemistry and Biochemistry, Dept. of Chemistry, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne*), Ursula Roethlisberger  
C1-O8 First-principles calculations of halide perovskites

**Session D1**

Chair: Jianhui Hou  
Room: Organic Photovoltaics

- 14:30 - 15:00 Monica Lira-Cantu (*Catalan Institute of Nanoscience and Nanotechnology (ICN2), CSIC and The Barcelona Institute of Science and Technology, Campus UAB, Bellaterra, 08193 Barcelona, Spain*)  
D1-IS1 Novel Metal Oxides as Transport Layers in Halide Perovskite Solar Cells
- 15:00 - 15:15 Chang He (*Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences*)  
D1-O1 Optimized molecular orientation and domain size enables efficient non-fullerene small-molecule organic solar cells



15:15 - 15:30 B1-O2	<b>Ruseckas, Arvydas</b> ∨ University of St Andrews	Charge recombination in methylammonium lead triiodide at low temperatures ∨
15:30 - 15:45 B1-O3	<b>Tang, Xiaofeng</b> ∨ University of Erlangen-Nuremberg	Topography-dependent phase-segregation in mixed-halide perovskite ∨
15:45 - 16:00 B1-O6	<b>Savenije, Tom</b> ∨	How Charge Carrier Dynamics are Affected by Light Soaking in (Mixed) Halide Perovskites ∨

16:00 - 16:30 Coffee Break

16:30 - 16:45 B1-O4	<b>Miguez, Hernan</b> ∨ Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)	Origin of Light Induced Ion Migration in Organic Metal Halide Perovskites in the Presence of Oxygen ∨
16:45 - 17:00 B1-O5	<b>Westbrook, Robert</b> ∨	Illuminating Charge-Transfer at the Absorber/Hole Transport Material Interface in Perovskite Solar Cells ∨
17:00 - 17:15		Abstract not programmed
17:15 - 17:30		Abstract not programmed

### Session C1

Chair: Dieter Neher

14:30 - 15:00 C1-IS1	<b>Armin, Ardalan</b> ∨ Sustainable Advanced Materials (S&A-SAM), Department of Physics, Swansea University, UK	Shockley-type versus Transport-limited Organic Solar Cell ∨
15:00 - 15:15 C1-O1	<b>Hutter, Eline</b> ∨	The Role of the Monovalent Cation on the Recombination Kinetics in Lead Iodide Perovskites ∨
15:15 - 15:30 C1-O2	<b>Contreras-Bernal, Lidia</b> ∨ Pablo de Olavide University, Sevilla, Spain	Small perturbation analysis of perovskite solar cells: feature extraction and modelling ∨
15:30 - 15:45 C1-O3	<b>Kaiser, Waldemar</b> ∨	Simulation of ion migration in perovskite solar cells using a kinetic Monte Carlo/drift diffusion numerical model and analysis of the impact on device performance ∨
15:45 - 16:00 C1-O4	<b>Kozyreff, Gregory</b> ∨ Université libre de Bruxelles	Light trapping by intermittent chaos in a Photonic Fiber Plate ∨

16:00 - 16:30 Coffee Break

16:30 - 16:45 C1-O5	<b>Müller, Sebastian</b> ∨ University of Bristol, United Kingdom	Continuum limit of the Gaussian disorder model for organic solar cells ∨
16:45 - 17:00 C1-O6	<b>Galisteo-López, Juan F.</b> ∨ Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla (ICMS), Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), Universidad de Sevilla	Absorption and emission of light in optoelectronic nanomaterials: the role of the local optical environment ∨

17:00 - 17:15 **Kaenburg, Pascal** ∨ Impact of Non-linear Shunts from Pinholes on Device  
C1-O7 Performance ∨

17:15 - 17:30 **Mladenovic, Marko** ∨ First-principles calculations of halide perovskites ∨  
C1-O8 Institute of Chemistry and  
Chemical Engineering, École  
Polytechnique Fédérale  
Lausanne

Marko Mladenovic<sup>a</sup>, Ursula Roethlisberger<sup>a</sup>

<sup>a</sup>, Laboratory of Computational Chemistry and Biochemistry, Dept. of Chemistry, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, 4107, Lausanne, 1015, CH

Halide perovskites have gained large interest during the last years due to their rapidly growing solar cell photoconversion efficiency. However, it is still challenging to find a perovskite compound which provides high efficiency and good stability at the same time. In this work we investigate the electronic structure of tin and lead-based halide perovskites by performing electronic structure calculations with hybrid PBE0 functional and by taking spin-orbit coupling into the account. We find that band gap of formamidimim tin bromide is larger than that for formamidimim lead bromide, which is the opposite trend from those observed for similar pairs of halide perovskite compounds. We comment on the possible origins of such an unusual band gap inversion by comparing structures of these two compounds and effect of spin-orbit coupling. As a conclusion, we find that band gap inversion comes as the consequence of big differences in spin-orbit coupling effect, while the large cation distorts the structure and prevents higher antibonding overlap.

## Session D1

Chair: Jianhui Hou

14:30 - 15:00 **Lira-Cantu, Monica** ∨ Novel Metal Oxides as Transport Layers in Halide Perovskite  
D1-IS1 Catalan Institute of  
Nanoscience and  
Nanotechnology (ICN2) Solar Cells ∨

15:00 - 15:15 **He, Chang** ∨ Optimized molecular orientation and domain size enables efficient  
D1-O1 Institute of Chemistry, Chinese non-fullerene small-molecule organic solar cells ∨  
Academy of Sciences (ICCAS)

15:15 - 15:30 **Leijten, Z.J.W.A.** ∨ Mapping of oxygen and water related degradation across  
D1-O2 P3HT:PCBM interfaces ∨

15:30 - 15:45 **Zhao, Wenchao** ∨ Over 13% Efficiency in Blade-coated Organic Solar Cells ∨  
D1-O3

15:45 - 16:00 **Yao, Huifeng** ∨ Modulation of Intramolecular Charge Transfer Effect in Highly  
D1-O4 Institute of Chemistry, Chinese Efficient Non-fullerene Acceptor ∨  
Academy of Sciences (ICCAS)

16:00 - 16:30 Coffee Break

16:30 - 16:45 **Colberts, Fallon** ∨ Processing of polymer solar cells on a water substrate ∨  
D1-O5

16:45 - 17:00 **Negi, Vikas** ∨ Full 3D simulation of phase separation in solution-processed  
D1-O6 organic solar cells ∨

17:00 - 17:15 **Li, Mengmeng** ∨ Impact of Device Polarity on the Photovoltaic Performance of  
D1-O7 Molecular Materials and Polymer Solar Cells ∨  
Nanosystems, Eindhoven

## Symposia &amp; program

[Plenary sessions](#)
[Exhibition](#)
[E-MRS tv](#)
[Satellite events](#)
[Practical Information](#)

## 2019 Spring Meeting

## MATERIALS FOR ENERGY

Halide perovskites: low dimensions for devices

INFORMATION

PROGRAM

[May 27, 2019](#) [May 28, 2019](#) [May 29, 2019](#) [May 30, 2019](#) [May 31, 2019](#)

START AT	SUBJECT	View All	NUM.
	<a href="#">Lead free halide perovskites</a> : Paulina PLOCHOCKA		
09:00	Computational design of novel double perovskites	~	G.6.1
09:30	Novel low-dimensional tin and antimony halide compounds: structures, properties and perspective applications	~	G.6.2
09:45	<b>Lead-free materials for solar cell applications</b> Authors : Marko Madenovic Ursula Roethlisberger Affiliations : École polytechnique fédérale de Lausanne Laboratory of Computational Chemistry and Biochemistry Resume : Halide perovskite have attracted enormous interest during the last decade due to their outstanding electronic properties. However, there are still unsolved issues that keep halide perovskites out of large-scale market: their instability and lead toxicity. To tackle the second issue, we have investigated halide perovskites based on Ge and Sn and silver bismuth iodides. We identified few lead-free halide perovskite compounds that can replace Pb-based ones and we discuss their stability with respect to decomposition and oxidation. We have additionally found that silver bismuth iodides, despite having band gaps suitable for solar cell application, have few intrinsic drawbacks which limit their solar cell efficiency.	^	G.6.3
10:00	COFFEE break		
	<a href="#">Joint session with symposium B: Strategies for More Stable Perovskite Solar Cells</a> : Maksym KOVALENKO		
10:30	Tailoring phase purity, crystallinity and orientation in 2D perovskites for high-efficiency optoelectronic devices	~	G.7.1
11:00	Defect Physics and (In)Stability in Metal-halide Perovskite Semiconductors	~	G.7.2
11:30	From Multifunctional Molecular Modulation to Layered Two-Dimensional Architectures for Stable Hybrid Perovskite Solar Cells	~	G.7.4
11:45	Ultra-high open circuit voltage beyond the 90% Shockley-Queisser limit in high efficiency wide bandgap perovskite solar cells	~	G.7.5
12:30	LUNCH		
	<a href="#">Extended and localized states: excitons, polarons,...</a> : Harald HILLENBRECHT		
14:00	Polaron signatures in 2D layered hybrid perovskites from spectroscopy modeling	~	G.8.1
14:30	Optical properties and exciton recombination in Metal Halide Perovskites	~	G.8.2
14:45	Observation of an important exciton dissociation in confined multi-layered Ruddlesden-Popper Perovskites	~	G.8.3
15:00	Optical spectroscopy of 2D perovskites in high magnetic fields	~	G.8.4
15:15	Light emission from stoichiometrically tuned quasi two-dimensional perovskites	~	G.8.5
15:30	COFFEE break		
	<a href="#">Growth and Upscaling</a> : Aditya D. MOHITE		
16:00	Photovoltaic lead halide perovskite nanowires: quest for epitaxial growth condition?	~	G.9.1
16:30	Perovskite module characterization using dark lock-in thermography and luminescence imaging	~	G.9.2
16:45	Continuous mass production of green-emitting Cs4PbBr6 perovskite luminescence materials for display application	~	G.9.3
17:00	Ultra-lightweight, Flexible and Semitransparent Colloidal Quantum Dot Solar Cells	~	G.9.4
19:00	Graduate Student Award ceremony followed by the social event		

## Symposium Sponsors



## Symposium organizers

**Claudine KATAN**

 ICR - Institut des Sciences Chimiques  
Campus de Beaulieu, Bât. 10B,  
Case 1009, F-35042 Rennes,  
France

 Phone : +33682580335  
Mail : [claudine.katan@univ-rennes1.fr](mailto:claudine.katan@univ-rennes1.fr)
**Constantinos C. STOUMPOS**

 University of Crete  
Department of Materials Science  
and Technology, Heraklion, Crete,  
Greece

 Mail : [cstoumpos@materials.uoi.gr](mailto:cstoumpos@materials.uoi.gr)
**Samuel STRANKS**

 University of Cambridge  
JJ Thomson Avenue, Cambridge  
CB3 0HE, UK

 Phone : +44 1223 337288  
Mail : [sds65@cam.ac.uk](mailto:sds65@cam.ac.uk)

print (4)

share (3)

## 2019 Spring Meeting

## MATERIALS FOR ENERGY

Halide perovskites: low dimensions for devices

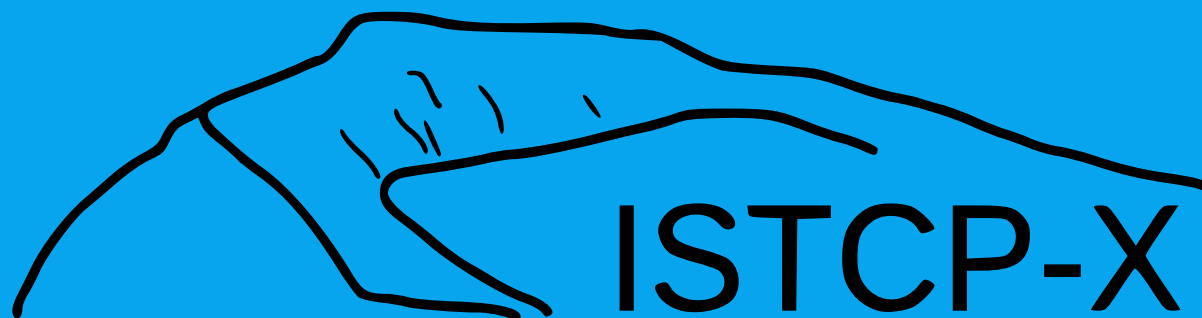
INFORMATION		PROGRAM		
May 27, 2019	May 28, 2019	May 29, 2019	May 30, 2019	May 31, 2019
START AT	SUBJECT	View All	NUM.	
<a href="#">Toward logic design with perovskites</a> : Stefaan DE WOLF				
09:00	Bismuth-doped 2D Cesium Lead Iodide Perovskite with Enhanced Air-Stability for Resistive Switching Memory and Artificial Synapse	~	G.13.1	
09:15	High-Performance Cross-Point Resistive Memory Devices Based on Solution-Processed Organo-Metal Halide Perovskite	~	G.13.2	
09:30	2D Hybrid Organic-Perovskite Blends for Resistive Switching Memory Devices	~	G.13.3	
09:45	Photolithographically patterned solution processed perovskite transistor towards circuit application	~	G.13.4	
10:00	COFFEE break			
<a href="#">Versatility of 2D Halide Perovskites</a> : Jacky EVEN				
10:30	2D Halide Perovskites: Unrivaled Versatility for Semiconductor Design and Fabrication	~	G.14.1	
11:00	Control of Quantum Well Orientation and Distribution in Quasi-2D Perovskite Films	~	G.14.2	
11:15	Crystallization of Reduced Dimensional Perovskites: An in situ Viewpoint	~	G.14.3	
11:30	Low-dimensional Hybrid Perovskites Containing an Organic Cation with an Extended Conjugated System	~	G.14.4	
11:45	"The role of spacer molecules in designing 2D Ruddlesden-Popper perovskites" Authors : F.Jahanbakhshi, M.Mladenovic, N.Ashari Astani and U.Roethlisberger Affiliations : Laboratory of Computational Chemistry and Biochemistry, Ecole polytechnique fédérale de Lausanne (EPFL) Laboratory of Computational Chemistry and Biochemistry, Ecole polytechnique fédérale de Lausanne (EPFL) Physics Department, Sharif University of Technology Laboratory of Computational Chemistry and Biochemistry, Ecole polytechnique fédérale de Lausanne (EPFL) Resume : "The role of spacer molecules in designing 2D Ruddlesden-Popper perovskites" F.Jahanbakhshi, M.Mladenovic, N.AshariAstani and U.Roethlisberger Ruddlesden-Popper (RP) 2D perovskites have the generic chemical formula (RNH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> MAn-1MnX <sub>3n+1</sub> where RNH <sub>3</sub> is an organic ammonium ion that acts as spacer between the 3D perovskite layers and methyl ammonium (MA) mostly serves as a monovalent cation, with M being a bivalent cation (e.g. Pb, Sn, ...), and X representing a halogen. Basically, any aliphatic ammonium salt with a larger organic part can be used as spacer, however, butyl ammonium (BA), phenethylammonium (PEA), hexylammonium (Hex), 5-ammonium valeric acid (5-AVA), anilinium (Anyl), and benzyl ammonium have so far been incorporated. Despite the general agreement on the positive effect of the spacers on either the efficiency or the stability, it is not yet clear, whether the overall success is due to the formation of RP phases regardless of the type of spacer, or the spacer chemical composition also matters in cross-linking and determining RP phase properties. We have performed a comparative study to characterise structural and electronic properties of 2D RP phases with 5-AVA spacer and to compare them to analogous structures of other ligands such as BA. We have found that aliphatic spacers affect electronic properties of the 2D perovskites by distortions imposed on the perovskite frame, while the chemical composition of such spacer molecules is not as important as their geometrical arrangement in the isolating layer.	~	G.14.5	
12:00	CLOSING REMARKS AND AWARDS CEREMONY			



## Symposium organizers

<b>Claudine KATAN</b> ISCR - Institut des Sciences Chimiques Campus de Beaulieu, Bât. 10B, Case 1009, F-35042 Rennes, France Phone : +33682580335 Mail : claudine.katan@univ-rennes1.fr	<b>Constantinos C. STOUMPOS</b> University of Crete Department of Materials Science and Technology, Heraklion, Crete, Greece Mail : cstoumpo@materials.uoc.gr	<b>Samuel STRANKS</b> University of Cambridge JJ Thomson Avenue, Cambridge CB3 0HE, UK Phone : +44 1223 337288 Mail : sds65@cam.ac.uk
---	--	---





# ISTCP-X

## BOOK OF ABSTRACTS



10<sup>th</sup> Congress of the International Society of Theoretical Chemical Physics

Tromsø, 11-17 July 2019



## Atomistic origins of the preferential stabilization of perovskite over non-perovskite phases of mixed cation lead halide perovskites

Ariadni Boziki<sup>a</sup>, Simone Meloni<sup>a,§</sup>, Marko Mladenović<sup>a</sup> and Ursula Rothlisberger<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Laboratory of Computational Chemistry and Biochemistry, Institute of Chemical Sciences and Engineering, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, § Present address: Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche (DipSCF), Università degli Studi di Ferrara – Unife*  
ursula.roethlisberger@epfl.ch

Mixed cation lead halide perovskites have attracted wide attention due to the possibility of preferentially stabilizing the perovskite phase with respect to photovoltaically less suitable competing phases.[1-2] In this work, through a theoretical analysis, we study the phase stability of binary  $\text{HC}(\text{NH}_2)_2^+$  ( $\text{FA}^+$ )-rich[1] and  $\text{Cs}^+$ -rich  $\text{FA}/\text{Cs}$  and  $\text{CH}_6\text{N}_3^+$  ( $\text{GUA}$ )/ $\text{FA}$  mixtures as well as ternary  $\text{Cs}/\text{GUA}/\text{FA}$  mixtures. Our study yields a series of design principles for the fabrication of stable lead halide perovskites with mixtures of monovalent cations.

Calculations of  $\text{FA}^+$ -rich  $\text{Cs}_x\text{FA}_{(1-x)}\text{PbI}_3$  ( $0 < x < 0.5$ ),[1] suggest that if the structural characteristics of the non-perovskite  $\delta$  phases of the pure compounds differ significantly, mixing is energetically favoring the perovskite over the non-perovskite phase. However, despite the significant differences in the  $\delta$  phases of  $\text{FAPbI}_3$  and  $\text{CsPbI}_3$ , in  $\text{Cs}^+$ -rich  $\text{FA}_x\text{Cs}_{(1-x)}\text{PbI}_3$  ( $0 < x < 0.5$ ) mixtures, stable perovskite phases cannot be formed. This contrasting finding leads us to consider not only the structural differences between the non-perovskite phases of the pure compounds but also the volume difference between their perovskite phases. Indeed, mixing in the perovskite phase is getting unfavorable upon incorporation of a large cation into a relatively small lattice.

Although mixing of  $\text{FA}/\text{GUA}$  is possible, it is not sufficient to stabilize the perovskite phase at room temperature. Probing the possible stabilization in ternary  $\text{Cs}/\text{GUA}/\text{FA}$  mixtures, instead we conclude that stable mixtures that contain 17% of  $\text{Cs}^+$  and  $\text{GUA}$  up to 33% can be formed. This finding reveals a third design principle, according to which mixing monovalent cations that would be per set outside the stability range with other cations that can compensate the size, so that the average radii of the mixed cations lies within the suitable Goldschmidt tolerance range[3] can lead to the formation of ternary perovskite mixtures with enhanced stability.

Our investigations on the potential preferential stabilization of the perovskite phase upon mixing is complemented by band gap calculations of the mixtures that show that the stable perovskite phases of binary  $\text{FA}^+$ -rich  $\text{FA}/\text{Cs}$  and of the ternary  $\text{Cs}/\text{GUA}/\text{FA}$  mixtures can be potential candidates for single-junction solar cell applications. In addition, if the perovskite phase of  $\text{Cs}^+$ -rich  $\text{Cs}/\text{FA}$  mixtures could be kinetically trapped it would be a potential candidate for tandem solar cell applications. In such a way, our suggested design principles pave the way for the preparation of mixed cation lead halide perovskites with enhanced stability and optical properties.

### References

1. C. Yi, J. Luo, S. Meloni, A. Boziki, N. Ashari-Astani, C. Grätzel, S. M. Zakeeruddin, U. Röthlisberger and M. Grätzel, *Energy Environ. Sci.* **9** (2016), 656.
2. M. Saliba, T. Matsui, K. Domanski, J.-Y. Seo, A. Ummadisingu, S. M. Zakeeruddin, J.-P. Correa-Baena, W. R. Tress, A. Abate, A. Hagfeldt and Michael Grätzel, *Science* **354** (2016), 206.
3. V. M. Goldschmidt, *Sci. Nat.* **14** (1926), 477.

7-11th October 2019  
Belgrade, Serbia



<http://www.sfkm.ac.rs/>

# The 20th Symposium on Condensed Matter Physics

---

# BOOK OF ABSTRACTS

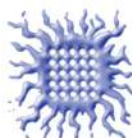
---



University of Belgrade,  
Faculty of Physics



Institute of Physics Belgrade



Vinca Institute  
of Nuclear Sciences



Serbian Academy  
of Sciences and Arts



Ministry of Education, Science and  
Technological Development,  
Republic of Serbia

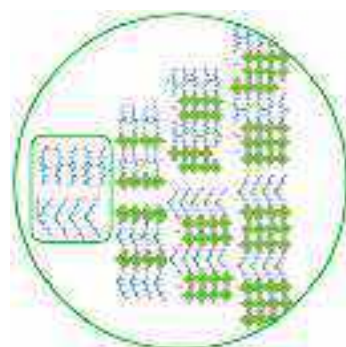
# Ruddlesden-Popper phases of 2D halide perovskites

Marko Mladenović<sup>a,b</sup>, Farzaneh Jahanbakhshi<sup>a</sup> and Ursula Röthlisberger<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratory of Computational Chemistry and Biochemistry, École Polytechnique Fédérale de Lausanne

<sup>b</sup>Scientific Computing Laboratory, Center for the Study of Complex Systems, Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade

**Abstract.** Halide perovskites are promising candidates for solar cell applications due to their outstanding electronic and transport properties. However, their instability at finite temperature presents an unsolved issue that keeps them out of large-scale market. Addition of large organic spacers and reducing dimensionality of halide perovskites have been shown to have beneficial effects on their stability. In this work, we study electronic and structural properties of Ruddlesden-Popper phases 2D halide perovskites based on 5-ammonium valeric acid (AVA)<sup>1,2</sup>. In contrast to aromatic and aliphatic spacers without additional functional groups, the RP phases of AVA are characterized by the formation of a regular and stable H-bonding network between the carbonyl head groups of adjacent AVA molecules in opposite layers (Fig. 1), which may lead to an enhanced thermal stability. Additionally, we have developed a theoretical framework that can predict and correlate electronic and structural properties of any 2D halide perovskite system, which may serve as a guideline to design new compounds.



**FIGURE 1.** Structural model of Ruddlesden–Popper (RP) phases of  $\text{AVA}_2(\text{CH}_3\text{NH}_3)_{n-1}\text{Pb}_n\text{I}_{3n+1}$  for  $n = 1, 2,$  and  $3$ .

## REFERENCES

1. N. Ashari-Astani, F. Jahanbakhshi, M. Mladenović, A. Q. M. Alanazi, I. Ahmadabadi, M. R. Ejtehadi, I. Dar, M. Grätzel, and U. Röthlisberger, Ruddlesden-Popper phases of methylammonium-based 2D perovskites with 5-ammonium valeric acid  $\text{AVA}_2\text{MA}_{n-1}\text{Pb}_n\text{I}_{3n+1}$  with  $n = 1, 2$  and  $3$ , *Journal of Physical Chemistry Letters*. **10** (13), 3543-3549 (2019)
2. Anwar Q. Alanazi, Dominik J. Kubicki, Daniel Prochowicz, Essa A. Alharbi, Marine E. F. Bouduban, Farzaneh Jahanbakhshi, Marko Mladenović, Jovana V. Milić, Fabrizio Giordano, et al, Atomic-Level Microstructure of Efficient Formamidinium-Based Perovskite Solar Cells Stabilized by 5-Ammonium Valeric Acid Iodide Revealed by Multi-Nuclear and Two-Dimensional Solid-State NMR, *submitted*