

ПРИМЉЕНО: 04. 07. 2022			
Рад.јед.	б р о ј	Арх.шифра	Прилог
0901	852/1		

Научном већу Института за физику у Београду

Извештај комисије за избор Милана Јоцића у звање истраживач сарадник

На седници Научног већа Института за физику у Београду одржаној 28. јуна 2022. године именовани смо у комисију за избор Милана Јоцића у звање истраживач сарадник.

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

Биографски подаци о кандидату

Милан Јоцић је рођен 6. маја 1992. године у Нишу, где је завршио основну школу 2007. године. Исте године је уписао Гимназију „Светозар Марковић“ у Нишу и завршио је 2011. године.

Школске 2011/2012. године је уписао основне академске студије физике на Природно-математичком факултету Универзитета у Нишу, на Департману за физику. Дипломирао је 2014. године са просечном оценом 9,13, а након тога је на истом факултету уписао мастер академске студије, модул Општа физика. У октобру 2016. године је одбранио мастер рад из предмета Квантна механика код доц. др Ненада Љ. Милојевића под називом „Трансфер електрона у судару протона са хелијумом (*Electron Transfer in Proton-helium Collision*)“, чиме је завршио мастер студије са просечном оценом 9,85.

Школске 2016/2017. године је уписао докторске академске студије физике на Природно-математичком факултету Универзитета у Нишу. Од школске 2018/2019. под менторством др Ненада Вукмировића бави се теоријском физиком кондензоване материје, у оквиру које изучава електронске особине халидних перовскитних материјала и наноструктура. Одлука о усвајању теме докторске дисертације под називом *Електронска својства перовскитних нанокристала* донета је 18. 4. 2022. године.

Запослен је на Институту за физику у Београду од 2017. године. У звање истраживач приправник изабран је 5. маја 2020. године.

Преглед постигнутих научних резултата

Милан Јоцић се у свом научном раду бави изучавањем електронске структуре неорганских халидних перовскитних материјала и наноструктура.

Халидни перовскитни материјали су изазвали велику пажњу научне заједнице у последњих десетак година јер се открило да имају изузетне оптоелектронске особине. Нагли раст интересовања за истраживање ових материјала је започео 2012. године када су пријављене соларне ћелије које су направљене јефтиним поступком прераде у раствору које су имале ефикасност преко 10%. Даљи развој ових материјала у наредних неколико година је довео до развоја соларних ћелија са ефикасношћу преко 20%. Кристална структура ових материјала је кубична на вишим температурама, а њихова хемијска формула је ABX_3 . Притом је X халогени елемент (Cl, Br или I), елемент B је најчешће Pb или Sn, док A може бити или органска група (нпр. CH_3NH_3) или елемент из прве групе (најчешће Cs). Иако су првобитна истраживања била усмерена претежно на халидне перовските са органском групом, показало се потом и да чисто неоргански перовскити имају слична својства, тако да је веома значајно истраживати и њих.

Након што су халидни перовскитни материјали детаљно истраживани са експерименталне стране током претходних година, остало је пуно отворених питања за теоријска истраживања. Теоријска истраживања су углавном била фокусирана на кристалне перовскитне материјале и била су базирана на примени метода из првих принципа (*ab-initio*) за прорачун електронске структуре материјала. Такви методи се не могу у пракси применити на нанокристале који садрже велики број атома и стога се одговарајући прорачун не може извршити у разумном времену. Истраживања кандидата су усмерена на развој или прилагођење метода који ће омогућити истраживање електронских стања у перовскитним нанокристалима.

Досадашњи рад кандидата се може поделити у две целине:

1. Кандидат је најпре развио поступак који омогућава да се полазећи од *ab-initio* прорачуна кристала конструише Хамилтонијан у репрезентацији анвелопних функција ($k \cdot p$ Хамилтонијан), који се затим може применити и на нанокристале. Поступак се огледа у следећем. На основу прорачуна електронске структуре материјала у оквиру теорије функционала густине добијају се таласне функције и енергије електронских стања у материјалу. Сви параметри који се јављају у $k \cdot p$ Хамилтонијану се могу директно израчунати из добијених енергија електронских стања и из матричних елемената оператора импулса између добијених таласних функција. Ипак, тако добијени $k \cdot p$ Хамилтонијан би имао изузетно компликован облик који се разликује од конвенционалних симетријски адаптираних облика који се обично дају у литератури. Да би се $k \cdot p$ Хамилтонијан довео у симетризовану форму, примењена је унитарна трансформација на скупу таласних функција из сваког простора дегенерисаних електронских стања. Цела процедура је успешно примењена на CdSe материјал са цинкблендном кристалном структуром.

2. Након тога, кандидат је детаљно истраживао електронску структуру неорганских халидних перовскитних материјала узимајући у обзир све релевантне ефекте, како би се добила електронска структура кристала на основу које ће се конструисати

Хамилтонијан у репрезентацији анвелопних функција. Електронска структура материјала је најпре израчуната коришћењем хибридног PBE0 функционала. Ефекти промене електронске структуре материјала са температуром су узети у обзир у оквиру Ален-Хајне-Кардона теорије (Allen-Heine-Cardona theory) која урачунава електрон-фонон интеракцију. Улазни параметри теорије добијени су прорачуном фононског спектра коришћењем пертурбационе теорије функционала густине (Density Functional Perturbation Theory - DFPT) и из прорачуна фононских фреквенци који узима у обзир и анхармонијске ефекте коришћењем самоусаглашеног фононског метода (self-consistent phonon method) за дате материјале.

У даљем истраживању кандидат ће применити развијене методе на проучавање електронске структуре перовскитних нанокристала.

Списак објављених радова кандидата

Радови у врхунским међународним часописима (категорија M21)

- M. Jocić and N. Vukmirović,
Ab Initio Construction of Symmetry-adapted $k\cdot p$ Hamiltonians for the Electronic Structure of Semiconductors,
Phys. Rev. B **102**, 085121 (2020).

Саопштења са скупа националног значаја штампана у изводу (категорија M64)

- M. Jocić and N. Vukmirović,
Construction of symmetry-adapted $k\cdot p$ Hamiltonian from DFT calculations,
ETSF Young Researchers' Meeting, 2-7 June 2019, San Sebastian, Spain, p. 43-44
- M. Jocić and N. Vukmirović,
Construction of symmetry-adapted $k\cdot p$ Hamiltonians for semiconductor nanostructures,
The 19th Young Researchers' Conference, 1-3 December 2021, Belgrade, Serbia, p. 50

Закључак и предлог

Милан Јоцић испуњава све услове за избор у звање истраживач сарадник предвиђене Правилником о стицању истраживачких и научних звања Министарства просвете, науке и технолошког развоја и Законом о науци и истраживањима. Досадашње научне резултате је објавио у једном раду у часопису М21 категорије и кроз два саопштења на конференцијама, а тема докторске дисертације је усвојена на Универзитету у Нишу.

Имајући у виду квалитет његовог научно-истраживачког рада и достигнути степен истраживачке компетентности, задовољство нам је да предложимо Научном већу Института за физику у Београду да изабере Милана Јоцића у звање истраживач сарадник.

У Београду, 4. јул 2022. год.


Чланови комисије:



др Ненад Вукмировић
научни саветник
Институт за физику у Београду



др Антун Балаж
научни саветник
Институт за физику у Београду



др Ненад Милојевић
ванредни професор
Природно-математички факултет
Универзитет у Нишу