

ИНСТИТУТ ЗА ФИЗИКУ			
ПРИМЉЕНО: 09-03-2018			
Рад.јед.	б р о ј	Арх.шифра	Прилог
0801	317/1		

Научном већу Института за физику у Београду

Предлог за Студентску награду Института за физику у Београду

За Студентску награду Института за физику у Београду предлажем др Марка Младеновића, научног сарадника, за докторску дисертацију *Electronic Properties of Interfaces between Domains in Organic Semiconductors* (Електронска својства органских полупроводника на границама домена), одбрањену 19. јануара 2017. године на Електротехничком факултету Универзитета у Београду. Уз ово образложење предлога прилажем и докторску дисертацију, стручну биографију кандидата, списак његових објављених радова и списак цитата на његове радове.

Образложење:

Истраживање представљено у тези кандидата се бави проблемом граница између домена у органским полупроводницима. У питању су материјали који су због могућности лаке и једноставне производње од великог значаја за примене у направама као што су диоде које емитују светлост (данас постоје комерцијално доступни OLED телевизори), транзистори са ефектом поља и соларне ћелије. И поред тога, разумевање карактеристика ових материјала је слабо због њихове комплексне структуре. Органски полупроводници на бази конјугованих полимера могу садржати уређене и неуређене домене, а органски полупроводници на бази малих молекула су у реалним направама увек поликристални, па је разумевање особина граница између домена кључно за разумевање особина ових материјала. До истраживања представљеног у овој тези готово и да није било теоријских истраживања која разматрају овај проблем.

У тези кандидата су по први пут представљена истраживања која омогућавају разумевање електронских особина граница између домена у две главне групе органских полупроводника: материјалима на бази малих молекула и материјалима на бази конјугованих полимера. Главни резултати истраживања су представљени у поглављима 3-6 тезе. У поглављу 3 је показано да у материјалима на бази малих молекула долази до формирања локализованих стања замки на граници између два кристална домена на местима где је електронска спрега између молекула највећа и развијен је метод за одређивање броја и енергетске расподеле тих стања. У поглављу 4 су испитивани ефекти термалне неуређености на локализацију електронских стања у уређеним доменима у материјалима на бази конјугованих полимера, што је било неопходно урадити да би се локализација услед овог ефекта могла раздвојити од евентуалне локализације на граници између домена. У поглављу 5 је разматрана граница између уређених и неуређених домена у материјалима на бази конјугованих полимера и показано је, насупрот случају материјала на бази малих молекула, да овде не долази до формирања стања замки на граници. Као успутни резултат овог истраживања, откривено је да један од најчешће испитиваних полимера поли(3-хексил)тиофен има спонтану поларизацију, па су ти ефекти испитивани у поглављу 6, где је показано и да одговарајуће електрично поље које притом настаје доводи до локализације носилаца на граници између два домена. Теза у целини на свеобухватан начин омогућава разумевање електронских стања на границама између домена у органским полупроводницима.

Целокупно истраживање је спроведено на Институту за физику у Београду уз коришћење суперрачунарског постројења PARADOX. За конструкцију атомске структуре материјала, кандидат је написао сопствене рачунарске кодове базиране на конфигурационој Монте Карло методи. Треба посебно истаћи да је то било кључно за генерисање атомске структуре конјугованих полимера јер развијени код користи као координате торзионе углове у полимеру што смањује број координата у опису и омогућава бржи пролаз кроз простор могућих конфигурација. С друге стране, коришћење неког од постојећих кодова у Декартовим координатама на бази молекуларне динамике или Монте Карла би вероватно водило ка томе да материјал остане у конфигурацији веома блиској почетној. За прорачун електронске структуре коришћени су претходно развијени кодови у нашој групи (базирани на методи склапања наелектрисања и методи преклопљених фрагмената), при чему их је кандидат прилагодио материјалима који су овде били од интереса. Кандидат је даље и написао програме који су омогућили постпроцесирање и статистичку анализу добијених резултата. Треба истаћи и јединственост целокупног методолошког приступа – за разумевање електронских стања на границама између домена потребно је разматрати системе са неколико хиљада атома, што није могуће урадити кодовима базираним на директној примени теорије функционала густине који се користе у групама које истражују електронске особине материјала.

Истраживање представљено у тези је објављено у четири оргинална рада (радови M21a-2, M21-1, M21-2 и M21-3 у приложеном списку радова), а део овог истраживања је приказан и у прегледном раду у угледном часопису *Advanced Functional Materials* (IF 11.8 - рад M21a-1). Тај рад је настао тако што је кандидат добио позив да га напише након што је на конференцији *European Materials Research Society Spring Meeting 2014* добио награду за најбољег младог истраживача у секцији *Компјутерско моделовање органских полупроводника*. Кандидат је одржао и позивно предавање у секцији *Progress Reports* на конференцији *Photonica 2017* у Београду (рад M32-1). Према подацима са *Web of Science* радови Марка Младеновића су досад цитирани 34 пута (од тога је 26 хетероцитата), а према *Google Scholar*-у су цитирани 45 пута (видети прилоге). Марко се тренутно налази на постдокторском усавршавању на EPFL-у у Лозани у једној од водећих група за симулације органских материјала и биомолекула.

Могу да кажем да је Марко показао велику посвећеност истраживачком раду и способност за решавање проблема. Као резултат тога, дошао је до оригиналних научних резултата који на целовит начин побољшавају наше разумевање једног важног истраживачког проблема. Желео бих и да истакнем да је кандидат урадио истраживање и написао и одбранио тезу у року од око 4 године и поред великог броја испита на докторским студијама (десет испита) и дугих административних процедура за пријаву и предају тезе. С обзиром на све наведено, велико ми је задовољство да предложим др Марка Младеновића за Студентску награду Института за физику у Београду.

У Београду,
9. март 2018.

др Ненад Вукмировић,
научни саветник,
Институт за физику у Београду