

НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ ФИЗИЧКОГ ФАКУЛТЕТА УНИВЕРЗИТЕТА У БЕОГРАДУ

Пошто смо 22.5.2019. године на осмој седници Наставно-научног већа Физичког факултета универзитета у Београду одређени у комисију за преглед и оцену докторског рада *Spin-orbit interaction in low dimensional systems: symmetry based approach* (*Спин-орбит интеракција у нискодимензионалним системима: симетријски приступ*) Марка Миливојевића, студента докторских студија Физичког факултета, подносимо

РЕФЕРАТ

1. Биографија

Марко Миливојевић је рођен 21. јуна 1989. године у Јагодини. Ту је завршио основну школу, а потом Математичку гимназију у Београду 2008. године. Исте године уписао се на Физички факултет Универзитета у Београду, смер Теоријска и експериментална физика. Основне студије је завршио 2012. године са просеком 9.63, и уписао мастер студије које је завршио 2013. године са просеком 10. Мастер рад је радио под менторством проф. др Милана Дамњановића. Школске 2010/2011 био је стипендиста фонда "Проф. др Ђорђе Живановић", а од 2011. до 2013. године стипендиста фонда за младе таленте Републике Србије – Доситеја. Докторске студије на Физичком факултету Универзитета у Београду, смер Квантна, математичка и нанофизика, уписује 2013. године. Положио је све испите и јануара 2017. године одбранио тему пред Колегијумом докторских студија. Од 2014. године запослен је на Факултету као истраживач приправник, а у звање истраживач сарадник изабран је 2016.

Досадашња истраживања кандидата спадају у научну област квантна и математичка физика. До сада је објавио 8 научних чланака у међународним часописима (3 категорије M21, а 5 из M22) чије је укупан импакт фактор 18.66 (сви су импакт фактора већег од један; појединачне категорије и импакт фактори су дати у списку публикација). Ангажован је на пројекту "Нискодимензионалне наноструктуре" Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије.

Опис докторског рада

1.1. Тема и циљеви

Тема истраживања обухваћених тезом је симетријска анализа ефеката спин-орбит интеракције код нискодимензионих система. У том смислу, у првом плану је конструкција одговарајућих двоструких група ових система, а затим и комплетног скупа нееквивалентних иредуцибилних репрезентација, што потом омогућава

коришћење познатих техника развијених за обичне групе, тј. групе геометирских симетрија система. На основу добијених резултата могуће је извршити прецизну селекцију система код којих је симетријски дозвољено спинско цепање, што је и један од алтернативних начина за добијање спински поларисаних струја. Имплементација добијених резултата, уз додавање спин-орбит зависног члана у Хамилтонијану у програм POLSym, омогућава нумеричку анализу ефеката на конкретним системима. Специјално, код једнодимензионалних система, овакав приступ отвара могућност детаљнијег испитивања ефеката кривине који су уочени код угљеничних нанотуба.

1.2. Садржај и резултати

Дисертација је подељена у четири главе, уз увод и закључак. Поред тога постоје и додаци: прва два су посвећена техничким детаљима извођења, а табеле са резултатима везаним за двоструке линијске групе дате су у Додатку Ц. Теза има укупно 104 стране, а у списку литературе наведено је 108 референци.

Прва глава уводи групно теоријске основе везане за разматрање спин-орбит интеракције. Да би се избегао проблем рада са пројективним репрезентацијама, у физици се најчешће користи формализам двоструких група. Како су групе симетрија физичких система подгрупе Еуклидове групе, дата је конструкција двоструке Еуклидове групе. У раду се изучавају ниско-димензионални, пре свега квази једно-димензионални системи, те се глава наставља специфичностима везаним за ознаке и структуру тих подгрупа. Поред осврта на линијске групе, које представљају групу симетрија квази-једнодимензионалних система, превасходна пажња је посвећена конструкцији двоструких линијских група и њихових иредуцибилних репрезентација. Као и код линијских група, двоструке линијске групе су класификоване у 13 бесконачних фамилија. Њихове иредуцибилне репре-зентације окарактерисане су истим квантним бројевима као репрезентације обичних линијских група, али се њихове вредности могу разликовати. Поред тога јавља се и нови квантни број парности везан за елемент ротације за угао 2π . Добијени резултати представљају основ за детаљну симетријску анализу (у главама 3 и 4) динамике електрона код квази-једнодимензионалних система уз укључен спински степен слободе.

У другој глави дат је генерални осврт на порекло спин-орбит интеракције. Наиме, како је у питању релативистички ефекат, полазећи од Диракове једначине за електрон, у нерелативистичком лимесу добија се форма Шредингерове једначине у којој се јавља спински зависан члан. Код изолованог атома овај члан је пропорционалан са $\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}$, док се код кристала најчешће разматрају два типа интеракције: Дреселхаусова, која је после-дица ефективног потенцијала у кристалу, и Рашбина, код система који се налазе у спољашњем електричном пољу. У одсуству оваквог поља, често је довољно не разматрати цео Дреселхаусов члан већ само део који потиче од јона на коме се електрон налази. У докторату су нумерички разматрани они ефекти који потичу од самог кристала, док ефекти Рашба члана нису анализирани. Један од најзначајнијих утицаја спин-орбит интеракције се огледа у ефекту цепања орбиталних енергетских зона, које може бити праћено и уклањањем спинске дегенерације. Веза између одсуства спинског цепања електронских зона у кристалу и просторне симетрије система је добро позната. Наиме, истовремена инваријатност Хамилтонијана на просторну и временску инверзију има за последицу спинску дегенерацију зона и након укључивања спин-орбит зависног члана. Стандардно, детаљнија симетријска анализа ефеката спин-орбит интеракције у систему, заснива се на пертурбативном

приступу и коришћењу малих група специјалних тачака. Следе резултати групно-теоријске анализе ефеката спин-орбит интеракције код квази-једнодимензионалних система: симетријски услови за цепање орбитних енергетских зона, њихови квантни бројеви и утицај на топологију зона. Наиме, Клебш-Горданова серија тензорског производа иредуцибилне репрезентације, по којој се трансформише конкретна орбитална зона, и спинске репрезентације указује на могућност њеног цепања орбитне електронске зоне на две гране или одсуство истог. Дејство појединачних симетрија на својствене векторе електронских зона укупног Хамил-тонијана и поређење средњих вредности спинског оператора одговарајућих својствених стања, даје комплетне симетријске услове за селекцију система код којих је цепање зоне праћено и уклањањем спинске дегенерације. Применом на двоструке линијске групе (уведене у Глави 1), нађени су сасвим општи резултати за квази једнодимензионалне системе. Испоставља се да постојање вертикалне равани рефлексије не дозвољава укидање спинске дегенерације зона, што оставља само групе из фамилија 1,...,5 као симетрије система код којих је то могуће. Ако је тотални Хамилтонијан инваријантан и на временску инверзију, укидање дегенерације је забрањено и у фамилијама 2, 3 и 4 услед комбинованог ефеката са хоризонталном рефлексијом или рото-рефлексијом. Из свега изведеног може се закључити да су једино системи код којих је група симетрије из прве или пете фамилија кандидати за генерисање спински поларисаних струја. Такође, код ових система, показано је да је ненулта очекивана вредност спинског оператора дуж правца периодичности/регуларности система. Конструкција група и њихових ИР-а омогућава нумеричке прорачуне имплементацијом у POLSum код, а тиме и још детаљнију анализу спин-орбит ефеката на топологију електронских зона и објашњење евентуалне промене поларизације дуж појединих зона код конкретних система.

У последње две главе изложени су резултати детаљне анализе спин-орбит ефеката код два најзначајнија квази-једнодимензиона система. Прво су дати резултати везани за ефекте спин-орбит интеракције у угљеничним нанотубама (Глава 3). Специјална пажња је усмерена као разликама између експерименталних резултата и теоријских предвиђања која се могу наћи у литератури. Нумеричка анализа је потврдила анизотропију цепања највишег валентног и најнижег проводног стања у квази-металним киралним тубама. Међутим, однос величине цепања горе поменутих зона је изразито осетљив на мале промене конфигурације тубе. Показано је да аксијално истезање драстично повећава цепање најниже проводне зоне док је ефекат на валентну обрнут, па управо присуство слабог аксијалног истезања у експерименту може бити узрок разлике између теоријских и експерименталних резултата.

Коначно, у четвртој глави пажња је посвећена анализи спин-орбит ефеката у MoS_2 нанотубама, које за разлику од угљеничних до сада нису изучаване. Повећано спинско цепање у угљеничним нанотубама, у поређењу са графеном, је често приписивано постојању кривине. Да би се анализирали ефекти кривине на цепање енергетских зона у MoS_2 тубама, потребно је упоредити резултате са MoS_2 слојем. Зато су конструисане двоструке групе дипериодичне групе D_{g78} , групе геометријске симетрије MoS_2 слоја. Код слојева, ови резултати коришћени су прво за детаљну симетријску анализу која објашњава зашто дуж одређених праваца у Брилуеновој зони не постоји спинско цепање и показује да је правац спинске поларизације у тачкама у којима је цепање постоји ортогоналан на слој. Затим, су имплементацијом добијених ИР-а израчунате електронске зоне слоја као и орбиталне композиције својствених стања дуж проводне и валентне зоне. Нумеричка анализа ефеката спин-орбит интеракције у MoS_2 нанотубама показује да је у неким тачкама Брилуенове зоне цепање повећано у односу на слој, док у другима ефекат кривине има негативан утицај

на цепање зоне. Као и код угљеничних туба, цепање зона доводи до укидања спинске дегенерације само код киралних туба. Анализа орбиталних доприноса зона указује на доминантан утицај d орбитала молибдена, што објашњава слабији ефекат кривине на величину цепања зона. Такође уочено је да кривина доводи до неједнаког доприноса орбитала са супротним вредностима атомског магнетног квантног броја. Са повећањем дијаметра ова разлика се све више смањује што у неким случајевима сугерише нулто цепање у разматраној k тачки.

2. Списак објављених чланака

Из докторске тезе произашли су чланци [6] и [7], док су резултати који су изложени у последњој глави у припреми за публикавање.

- [1.] N. Lazić, M. Milivojević, M. Damnjanović,
Spin arrangements of the first family line groups,
Phys. Status Solidi B **249** (2012) 2558–2561 (M22, IF 1.489).
- [2.] N. Lazić, M. Milivojević, M. Damnjanović,
Spin line groups,
Acta Crystallographica A **69** (2013) 611-619 (M22, IF 2.244).
- [3.] M. Milivojević, N. Lazić, T. Vuković and M. Damnjanović,
Regular phases of quasi-one-dimensional spin systems: Classification and imprints on diffraction,
Physical Review B **92** (2015) 165410 (M21, IF 3.718).
- [4.] M. Milivojević, D. Stepanenko,
Effective spin Hamiltonian of a gated triple quantum dot in the presence of spin-orbit interaction,
Journal of Physics: Condensed Matter **29** (2017) 405302 (M22, IF 2.617).
- [5.] M. Milivojević,
Symmetric spin-orbit interaction in triple quantum dot and minimisation of spin-orbit leakage in CNOT gate
Journal of Physics: Condensed Matter **30** (2018) 085302 (M22, IF 2.617).
- [6.] N. Lazić, M. Milivojević, T. Vuković, M. Damnjanović,
Double line groups: structure, irreducible representations and spin splitting of the bands, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **51** (2018) 225203 (M21, IF 1.963)
- [7.] M. Milivojević, N. Lazić, S. Dmitrović, M. Damnjanović, T. Vuković
Spin splitting in quasi- one dimensional systems,
Phys. Status Solidi B **255** (2018) 1800184 (M22, IF 1.729).
- [8.] M. Milivojević,
Maximal thermal entanglement using three-spin interactions,
Quantum Information Processing **18** (2019) 48 (M21, IF 2.283).

ЗАКЉУЧАК

Из наведеног је јасно да је предложени рад *Spin-orbit interaction in low dimensional systems: symmetry based approach* (Спин-орбит интеракција у нискодимензионалним системима: симетријски приступ) Марка Миливојевића, дипломираног физичара, оригиналан, и пре свега детаљан, допринос сагледавању улоге симетрије ниско димензионалних система у анализи ефеката спин-орбит интеракције. Узимајући у обзир савременост теме, уз презентовану примену групно-теоријских резултата на два најзначајнија нискодимензиона система, као и произашле чланке и квалитет часописа у којима је објављен тек један део истраживања, **предлажемо Наставно-научном већу Физичког факултета да одобри јавну одбрану ове докторске тезе.**

Београд, 25.6.2019.

др Татјана Вуковић, Ванредни професор,
Физички факултет, Универзитет у
Београду

др Милан Дамњановић, Редовни
професор, Физички факултет,
Универзитет у Београду

др Владимир Дамљановић,
Виши научни сарадник,
Институт за Физику, Београд