

## НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ ФИЗИЧКОГ ФАКУЛТЕТА УНИВЕРЗИТЕТА У БЕОГРАДУ

Пошто смо на седници Наставно-научног већа Физичког факултета Универзитета у Београду одржаној 12. 9. 2018. године одређени за чланове Комисије за преглед и оцену докторске дисертације „**Exciton Dynamics at Photoexcited Organic Heterojunctions**” (наслов на српском језику: „**Динамика екситона на органским хетероспојевима побуђеним светлошћу**”) из научне области Физика кондензованог стања, коју је кандидат Вељко Јанковић, мастер физичар, предао Физичком факултету у Београду дана 5. 9. 2018. године подносимо следећи

### ИЗВЕШТАЈ

#### 1. Основни подаци о кандидату

##### 1.1. Биографски подаци

Вељко Јанковић рођен је у Београду, Република Србија, 23. 9. 1990. године. У Београду је завршио основну школу и Математичку гимназију.

Основне академске студије на Физичком факултету Универзитета у Београду, смер Теоријска и експериментална физика, започиње 2009. године и завршава их 2013. године са просечном оценом 9,97. Мастер академске студије на Физичком факултету Универзитета у Београду, смер Теоријска и експериментална физика, завршио је јуна 2014. године са просечном оценом 10,00, одбравивши мастер рад на тему *Неравнотежна оптичка проводност у систему са локализованим електронским стањима*. Мастер рад је израђен у Лабораторији за примену рачунара у науци Института за физику у Београду, а израдом рада руководио је др Ненад Вукмировић. Октобра 2014. године рад је награђен наградом *Проф. др Љубомир Ћирковић* као најбољи мастер рад одбрањен током академске 2013/2014. године на Физичком факултету. Новембра 2014. године уписује докторске академске студије на Физичком факултету Универзитета у Београду, ужа научна област физика кондензоване материје. Ментор студија је др Ненад Вукмировић, научни саветник Института за физику у Београду.

Од академске 2013/14. године, Вељко Јанковић учествује у извођењу наставе на Физичком факултету Универзитета у Београду као сарадник у настави, током академске 2013/14. године на предмету Теоријска механика (предметни наставник проф. др Сунчица Елезовић-Хацић), а од академске 2014/15. године на предмету Квантна статистичка физика (предметни наставници доц. др Михајло Ваневић и проф. др Милан Кнежевић). Од школске 2015/16. године, као и током школске 2012/13. године, учествује у раду Државне комисије за такмичења ученика средњих школа из физике. Био је један од вођа тима Србије на 48. и 49. Међународној олимпијади из физике одржаним у јулу 2017. и 2018. године у Индонезији и Португалу.

Говори два светска језика, енглески (ниво C2 према Заједничком европском оквиру за језике) и италијански (ниво B2.2 према Заједничком европском оквиру за језике).

## **1.2. Научна активност**

Кандидат Вељко Јанковић се у свом научном раду бави проблемима неравнотежне динамике носилаца наелектрисања у полупроводничким материјалима. Од новембра 2014. године запослен је у Лабораторији за примену рачунара у науци на Институту за физику у Београду и ангажован је на пројекту основних истраживања ОН171017 *Моделирање и нумеричке симулације сложених вишечестичних система* Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије. Од октобра 2013. до августа 2015. године био је ангажован на FP7 пројекту Европске комисије *Електронски транспорт у органским материјалима*. До сада је објавио пет научних радова M21 категорије. Своје резултате је представио на међународним конференцијама у Београду, Саламанки (Шпанија), Ахену (Немачка), Луки и Трсту (Италија), Стразбуру (Француска), а похађао је и летњу школу *CECAM Summer School on Atomistic Simulation Techniques for Material Science, Nanotechnology and Biophysics* која је одржана у Трсту (Италија).

## **2. Опис предатог рада**

### **2.1. Основни подаци**

Дисертација је урађена под руководством др Ненада Вукмировића, научног саветника, запосленог на Институту за физику у Београду. Ментор испуњава услове Физичког факултета за руковођење израдом докторске дисертације јер је у научном звању и аутор је великог броја радова из области физике кондензованог стања који су објављени у врхунским међународним часописима и представљени на међународним и домаћим конференцијама. Теза је написана на енглеском језику на 280 страна, не рачунајући насловну страну, захвалнице, сажетак, садржај, биографију аутора и изјаве. У тексту се налази 5 табела и 60 слика и наведено је 207 референци. Теза је подељена у 8 поглавља и садржи 4 додатка.

### **2.2. Предмет и циљ рада**

Област истраживања коју обухвата ова теза је физика кондензоване материје. У току последње три деценије спроводе се интензивна и интердисциплинарна истраживања у области соларних ћелија на бази органских полупроводника. Истраживачки напори у овој области су мотивисани могућношћу економски исплативе и еколошки прихватљиве конверзије Сунчеве светлости у електричну енергију на хетероспојевима два органска материјала, од којих је један донор, а други акцептор електрона. Да би се извршила конверзија светлости у слободна наелектрисања у

органичним соларним ћелијама, неопходно је раздвојити иницијално генерисани донорски екситон, чија је енергија везе значајно већа од термалне енергије на собној температури, на слободне шупљину и електрон у материјалу донора, односно акцептора. Сматра се да се то раздвајање обавља путем трансфера електрона из светлошћу побуђеног материјала донора у материјал акцептора који води стварању такозваног СТ екситона (екситона у којем је дошло до трансфера наелектрисања), у којем су електрон и шупљина и даље јако везани. Упркос великој вредности везивне енергије како донорског, тако и СТ екситона, експерименти на најефикаснијим органичним соларним ћелијама указују на то да готово сви фотони апсорбовани у ћелији бивају конвертовани у слободне носиоце, при чему је та конверзија слабо потпомогнута како температуром, тако и унутрашњим електричним пољем у ћелији. Предложени су многобројни механизми који би могли да објасне горе поменуте експерименталне резултате. Међутим, још увек недостаје подробније разумевање фундаменталних физичких механизма који су одговорни за функционисање органичних соларних ћелија на различитим временским скалама.

Циљ истраживања чији су резултати презентовани у овој тези је управо да омогући разумевање механизма који су одговорни за раздвајање носилаца у органичним соларним ћелијама. То је остварено развијањем физички утемељених модела органичних полупроводника и њихових хетероспојева који описују ове процесе, а затим и детаљним проучавањем тих процеса. Процеси на ултрабрзој скали (испод једне пикосекунде) су разматрани у оквиру потпуно квантног модела који укључује све релевантне интеракције, а процеси на дужој временској скали у оквиру семикласичног модела.

### 2.3. Публикације

У овој докторској тези су представљени резултати 4 рада објављена у часописима M21 категорије.

1. V. Janković and N. Vukmirović,  
"Combination of Charge Delocalization and Disorder Enables Efficient Charge Separation at Photoexcited Organic Bilayers",  
J. Phys. Chem. C 122, 10343 (2018) [ISSN 1932-7447, IF2017 4.484].
2. V. Janković and N. Vukmirović,  
"Identification of Ultrafast Photophysical Pathways in Photoexcited Organic Heterojunctions",  
J. Phys. Chem. C 121, 19602 (2017) [ISSN 1932-7447, IF2017 4.484].
3. V. Janković and N. Vukmirović,  
"Origin of space-separated charges in photoexcited organic heterojunctions on ultrafast time scales",  
Phys. Rev. B 95, 075308 (2017) [ISSN 2469-9950, IF2017 3.813].
4. V. Janković and N. Vukmirović,  
"Dynamics of exciton formation and relaxation in photoexcited semiconductors",  
Phys. Rev. B 92, 235208 (2015) [ISSN 2469-9950, IF2015 3.718].

## 2.4. Преглед научних резултата изложених у дисертацији

Ова докторска дисертација је подељена у 8 поглавља.

У првом поглављу дат је увод у проблематику која је разматрана у тези, кроз осврт на глобални енергетски проблем, опис принципа рада соларних ћелија, преглед основних особина органских полупроводника и карактеристичних процеса у органским соларним ћелијама.

У другом поглављу је приказан стандардни Хамилтонијан који се користи за опис полупроводника који представља основу за сва разматрања у остатку тезе.

У трећем поглављу су приказани основни теоријски алати који су коришћени да се истражује ултрабрза динамика екситона у оквиру стандардног модела полупроводника. Хијерархија једначина која се јавља у оквиру формализма матрица густине је пресечена коришћењем динамички контролисаног одсецања. У овом поглављу је приказан и оригиналан резултат кандидата у ком је предложен поступак одсецања фононске гране који не нарушава законе одржања енергије и броја честица.

У четвртном поглављу су приказани оригинални резултати везани за ултрабрзу динамику носилаца у полупроводничком материјалу. Коришћен је моделни Хамилтонијан који укључује релевантне физичке ефекте (делокализација носилаца, Кулонова интеракција, носилац-фонон интеракција, интеракција са спољашњим електромагнетним пољем) и који за различите вредности моделних параметара може да симулира како неорганске, тако и органске полупроводнике. Динамика модела је проучавана у оквиру формализма матрице густине, при чему је посебна пажња посвећена одсецању фононске гране једначина тако да се не наруши закон одржања енергије и закон одржања броја честица. Временске скале релевантне за процесе формирања и (иницијалних етапа) релаксације екситона су одређене из нумеричког прорачуна у оквиру једнодимензионалног модела. Добијено је да се за параметре органских полупроводника формирање везаних екситона дешава на временској скали од неколико стотина фемтосекунди, након чега долази до њихове даље релаксације и уравнотежавања које траје барем неколико пикосекунди. Добијене временске скале су робустне на разумне варијације параметара модела (температура, јачина електрон-фонон спреге, јачина Кулонове интеракције).

У поглављу 5 су разматрани ултрабрзи процеси на граници два органска полупроводника са циљем да се са теоријске стране испита могућност раздвајања носилаца на временској скали реда стотине фемтосекунди након светлосне побуде. Резултати су показали да парови просторно раздвојених електрона и шупљине који постоје 100 fs након оптичке побуде система претежно настају њиховом директним оптичким генерисањем, а у много мањем уделу генерисањем екситона у једном

материјалу које је праћено његовим раздвајањем на граници између два материјала. Показано је и да је тај закључак неосетљив на вредности параметара материјала и њихове границе.

Циљ истраживања приказаног у поглављу 6 је био да се идентификују фотофизичке путање дуж којих се на временским скалама испод 1 ps обавља раздвајање електрон-шупљина парова. Резултати су показали да су екситонска стања у којима су носиоци наелектрисања делокализовани на хетероспоју кључна за ултрабрзо раздвајање електрон-шупљина парова из два разлога: један је могућност директног оптичког генерисања носилаца у тим стањима, а други је могућност ултрабрзог преласка иницијалних екситона у појединачном материјалу у та стања. Ипак, прорачуни показују да је број раздвојених електрон-шупљина парова 1 ps након побуде значајно мањи од укупног броја генерисаних парова, односно да се највећи део парова раздваја на дужим временским скалама.

С обзиром на наведено, изузетно је важно разумети процес раздвајања на дужој временској скали, што је био циљ истраживања приказаног у поглављу 7. Резултати су показали да је могуће веома ефикасно раздвајање носилаца како из СТ стања, тако и из стања екситона у донару. Као узрок ефикасног раздвајања носилаца, идентификована је комбинација ефеката делокализације носилаца и неуређености.

У поглављу 8 дат је преглед добијених резултата и закључак.

### 3. Списак публикација

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

1. V. Janković and N. Vukmirović,  
"Combination of Charge Delocalization and Disorder Enables Efficient Charge Separation at Photoexcited Organic Bilayers",  
*J. Phys. Chem. C* 122, 10343 (2018) [ISSN 1932-7447, IF2017 4.484].
2. V. Janković and N. Vukmirović,  
"Identification of Ultrafast Photophysical Pathways in Photoexcited Organic Heterojunctions",  
*J. Phys. Chem. C* 121, 19602 (2017) [ISSN 1932-7447, IF2017 4.484].
3. V. Janković and N. Vukmirović,  
"Origin of space-separated charges in photoexcited organic heterojunctions on ultrafast time scales",  
*Phys. Rev. B* 95, 075308 (2017) [ISSN 2469-9950, IF2017 3.813].
4. V. Janković and N. Vukmirović,  
"Dynamics of exciton formation and relaxation in photoexcited semiconductors",  
*Phys. Rev. B* 92, 235208 (2015) [ISSN 2469-9950, IF2015 3.718].

5. V. Janković and N. Vukmirović,  
“Nonequilibrium optical conductivity in materials with localized electronic states”,  
*Phys. Rev. B* 90, 224201 (2014) [ISSN 1098-0121, IF2014 3.736]

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

1. V. Janković and N. Vukmirović, Importance of Carrier Delocalization and Disorder for Incoherent Charge Separation at Organic Bilayers, European Materials Research Society Spring Meeting, Strasbourg, France, 18-22 June 2018, Oral contribution J12.7 (2018).
2. V. Janković and N. Vukmirović, Dynamics of Photoexcited Charges in Organic Heterojunctions – Insights from Theory and Simulation, The 18<sup>th</sup> IEEE International Conference on Nanotechnology, Cork, Ireland, 23-26 July 2018.
3. V. Janković and N. Vukmirović, Origin of space-separated charges in photoexcited organic heterojunctions on ultrafast time scales, Workshop on Spectroscopy and Dynamics of Photoinduced Electronic Excitations, International Center for Theoretical Physics, Trieste, Italy, 8–12 May 2017.
4. V. Janković and N. Vukmirović, Exciton formation and relaxation dynamics in photoexcited organic semiconductors and their heterojunctions: numerical study, Gordon Research Conference Electronic Processes in Organic Materials, Barga (Lucca), Italy, 5–10 June 2016. Poster Presentation 41 (2016).
5. V. Janković and N. Vukmirović, Nonequilibrium electrical transport in materials with localized electronic states, The 26th International Conference on Amorphous and Nanocrystalline Semiconductors, Aachen, Germany, 13–18 September 2015, Book of Abstracts, p. 72 (2015).
6. V. Janković and N. Vukmirović, Nonequilibrium high-frequency conductivity in materials with localized electronic states, The 19th Symposium on Condensed Matter Physics (SFKM), Belgrade, Serbia, 7–11 September 2015, Book of Abstracts, p. 88 (2015).
7. V. Janković and N. Vukmirović, Nonequilibrium terahertz conductivity in systems with localized electronic states, EDISON 19, 29 June–2 July 2015, Salamanca, Spain, Book of Abstracts, p. 125 (2015).
8. V. Janković and N. Vukmirović, Nonequilibrium terahertz conductivity in materials with localized electronic states, Nanoscale Quantum Optics-Kick off Workshop, 9–10 April 2015, Belgrade, Serbia, Book of Abstracts, p. 55 (2015).

## 5. Закључак

На основу изложеног, Комисија закључује да резултати кандидата Вељка Јанковића приказани у оквиру ове докторске дисертације представљају изузетно оригиналан и значајан научни допринос у области физике кондензоване материје. Из области дисертације кандидат има 4 објављена рада у врхунским међународним часописима. Сходно томе, комисија предлаже Наставно-научном већу Физичког факултета Универзитета у Београду да одобри јавну одбрану тезе:

**„Exciton Dynamics at Photoexcited Organic Heterojunctions”**

**(„Динамика екситона на органским хетероспојевима побуђеним светлошћу”)**

У Београду, 13. 9. 2018. године

др Ненад Вукмировић

Научни саветник

Универзитет у Београду – Институт за физику у Београду

---

проф. др Иванка Милошевић

Редовни професор

Универзитет у Београду – Физички факултет

---

проф. др Ђорђе Спасојевић

Редовни професор

Универзитет у Београду – Физички факултет

---