

ИЗВЕШТАЈ О ОЦЕНИ ДОКТОРСKE ДИСЕРТАЦИЈЕ

ПОДАЦИ О КАНДИДАТУ

Презиме, име једног
родитеља и име Јоцић (Милорад) Милан
Josić (Milorad) Milan
Датум и место рођења 06.05.1992, Ниш, Србија
06.05.1992, Niš, Serbia

УНИВЕРЗИТЕТ У НИШУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ У НИШУ

Примљено: 8.7.2025.

Орг. јед.	Број	Прилог	Вредност
01	1308		

Основне студије

Универзитет Универзитет у Нишу / University of Niš
Факултет Природно-математички факултет у Нишу / Faculty of Sciences and Mathematics
Студијски програм Физика / Physics
Звање Физичар / Bachelor of Science in Physics
Година уписа 2011.
Година завршетка 2014.
Просечна оцена 9.13

Мастер студије, магистарске студије

Универзитет Универзитет у Нишу / University of Niš
Факултет Природно-математички факултет у Нишу / Faculty of Sciences and Mathematics
Студијски програм Општа физика / General Physics
Звање Мастер физичар / Master of Science in Physics
Година уписа 2014.
Година завршетка 2016.
Просечна оцена 9.85
Научна област Физика / Physics
Наслов завршног рада Трансфер електрона у судару протона са хелијумом
Electron Transfer in Proton-Helium Collision

Докторске студије

Универзитет Универзитет у Нишу / University of Niš
Факултет Природно-математички факултет у Нишу / Faculty of Sciences and Mathematics
Студијски програм (ДАС) Физика / PhD Physics
Година уписа 2016
Остварен број ЕСПБ бодова 151
Просечна оцена 10.00

НАСЛОВ ТЕМЕ ДОКТОРСKE ДИСЕРТАЦИЈЕ

Наслов теме докторске дисертације Електронска својства перовскитних нанокристала
Наслов теме докторске дисертације на енглеском језику Electronic properties of perovskite nanocrystals
Име и презиме ментора, звање Ненад Вукмировић, научни саветник
Nenad Vukmirović, research professor
Име и презиме ментора, звање Ненад Милојевић, редовни професор
Nenad Milojević, full professor
Број и датум добијања сагласности за тему докторске дисертације 345/1-01, 06.04.2022.

ПРЕГЛЕД ДОКТОРСKE ДИСЕРТАЦИЈЕ

Број страна 214
Број поглавља 6

Број слика (шема, графика)	59
Број табела	4
Број прилога	4

ПРИКАЗ НАУЧНИХ И СТРУЧНИХ РАДОВА КАНДИДАТА који садрже резултате истраживања у оквиру докторске дисертације

Р. бр.	Аутор-и, наслов, часопис, година, број волумена, странице	Категорија
1	M. Jocić and N. Vukmirović, <i>Ab Initio Construction of Symmetry-adapted k-p Hamiltonians for the Electronic Structure of Semiconductors</i>, Physical Review B, 2020, 102, 085121. doi: 10.1103/PhysRevB.102.085121 k-p Хамилтонијани се често користе за описивање електронских нивоа у квантним наноструктурама. И поред тога, не постоји метод којим се њихов математички облик и параметри могу директно добити на основу ab initio прорачуна материјала од кога је наноструктура сачињена. Развијен је метод за добијање параметара и симетријски адаптираног облика k-p Хамилтонијана из ab initio прорачуна зонске структуре материјала. Овај метод састоји се од: (1) прорачуна матричних елемената оператора импулса између таласних функција добијених из прорачуна електронске структуре; (2) проналажења унитарних трансформација које трансформишу дате таласне функције у симетријски адаптиран базис; (3) трансформације k-p Хамилтонијана у симетријски адаптиран базис. Ова методологија је приказана добијањем k-p Хамилтонијана који описују електронске нивое за случај квантних јама кадмијум селенида (CdSe). Тако добијени резултати за електронске нивое квантних јама из k-p метода су у одличној сагласности са резултатима добијеним из теорије функционала густине, чак и за јамае јако малих димензија. k-p Hamiltonians are frequently employed to describe electronic states in quantum nanostructures. However, there is currently no method available for directly determining their mathematical form and parameters based on ab initio calculations of the constituent material. In this work, a methodology is developed for extracting the parameters and symmetry-adapted form of the k-p Hamiltonian from ab initio band structure calculations. The method comprises the following steps: (1) calculation of the matrix elements of the momentum operator between wave functions obtained from electronic structure calculations; (2) determination of unitary transformations that convert the given wave functions into a symmetry-adapted basis; and (3) transformation of the k-p Hamiltonian into this symmetry-adapted basis. The methodology is demonstrated through the derivation of k-p Hamiltonians describing electronic levels in cadmium selenide (CdSe) quantum wells. The electronic levels obtained via the k-p method show excellent agreement with those derived from density functional theory, even for quantum wells with very small dimensions.	M21
2	M. Jocić and N. Vukmirović, <i>Ab-initio Calculations of Temperature Dependent Electronic Structures of Inorganic Halide Perovskite Materials</i>, Physical Chemistry Chemical Physics, 2023, 25, 29017. doi: 10.1039/d3cp02054a Израчунали смо електронску структуру CsPbX₃ (X=Cl, Br, I) балк кристала помоћу DFT прорачуна на бази хибридних функционала са додатком корекција за селф-енергије које потичу од електрон-фонон интеракције. Добили смо температурску зависност за ширење и ренормализацију електронских нивоа коришћењем Аллен-Хајне-Кардона теорије уз помоћ метода који смо развили, а који је базиран на Мигдаловој самоконзистентној апроксимацији. Фононски спектар добијен је помоћу самоконзистентног фононског метода. Резултати показују да се процеп и његова температурска зависност добро слажу са експериментом. We calculated the electronic structure of CsPbX₃ (X = Cl, Br, I) bulk crystals using density functional theory (DFT) based on hybrid functionals, with the inclusion of self-energy corrections arising from electron-phonon interactions. The temperature dependence of the broadening and renormalization of electronic levels was obtained using the Allen-Heine-Cardona theory, implemented through a method we developed based on Migdal's self-consistent approximation. The phonon spectrum was computed using the self-consistent phonon method. The results demonstrate that the band gap and its temperature dependence are in good agreement with experimental data.	M21
3	M. Jocić and N. Vukmirović, <i>Temperature dependence of the electronic band gap of CsPbBr₃ quantum wells obtained using k-p method</i>, Facta universitatis - series: Physics, Chemistry and Technology, 2024, 22, 1-11. https://doi.org/10.2298/FUPCT2401001J Израчунали смо електронску структуру CsPbBr₃ квантне јамае помоћу k-p модела коришћењем параметара из DFT прорачуна на бази хибридних функционала са додатком корекција за селф-енергије које потичу од електрон-фонон интеракције. Добили смо температурску зависност процепа за различите величине квантне јамае. Резултати показују да је температурска зависност у квантним јамама, за све величине јамае које су узете у обзир, слична оној која се добија за балк фазу. We calculated the electronic structure of CsPbBr₃ quantum wells using the k-p model with parameters extracted from hybrid functional based DFT calculations supplemented with self-energy corrections arising from the electron-phonon interaction. We obtained the temperature dependence of the band gap for different sizes of the quantum well. The results show that the temperature dependence in quantum wells is similar to the one found in bulk phase for all sizes of the well that were considered.	M52

НАПОМЕНА: уколико је кандидат објавио више од 3 рада, додати нове редове у овај део документа

ИСПУЊЕНОСТ УСЛОВА ЗА ОДБРАНУ ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

Кандидат испуњава услове за оцену и одбрану докторске дисертације који су предвиђени Законом о високом образовању, Статутом Универзитета и Статутом Факултета.	ДА	НЕ
--	----	----

Кандидат Милан Јоцић, као први аутор, има два рада категорије M21 и један рад категорије M52, који су у потпуности из најуже области докторске дисертације, при чему је један рад у часопису који издаје Универзитет у Нишу. У том смислу, кандидат Милан Јоцић испуњава све услове за одбрану докторске дисертације.

The candidate, Milan Jocić, as the first author, has published two papers in category M21 and one paper in category M52, all of which are directly related to the core subject of the doctoral dissertation. One of these papers was published in a journal issued by the University of Niš. In this regard, the candidate Milan Jocić meets all the requirements for the defense of the doctoral dissertation.

ВРЕДНОВАЊЕ ПОЈЕДИНИХ ДЕЛОВА ДОКТОРСKE ДИСЕРТАЦИЈЕ

Кратак опис појединих делова дисертације (до 500 речи)

У првом поглављу дисертације дат је преглед значаја халидних перовскитних материјала и њихових наноструктура, као и преглед њихових примена за соларне ћелије и ЛЕД диоде.

У другом поглављу дате су основе теоријских метода које се користе у каснијим поглављима тезе. Дат је најпре подсетник основних појмова везаних за кристалне материјале. Затим су објашњени модел ефективне масе и $k \cdot p$ модел за електронску структуру материјала. Након тога, описана је теорија функционала густине за прорачун електронске структуре материјала. Потом су уведене методе за опис фононске структуре и интеракције између електрона и фонона. На крају поглавља дат је и кратак преглед појмова из теорије група која се користи у дисертацији.

У трећем поглављу, приказан је развој методе којом се полазећи од електронске структуре кристала добијене у *ab-initio* прорачуну конструише $k \cdot p$ Хамилтонијан. 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 из литературе. 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. Оваква процедура је успешно примењена на CdSe материјал са цинкблендном кристалном структуром.

У четвртм поглављу, представљени су методологија и резултати за електронску структуру перовскитних материјала CsPbX_3 укључујући и њену температурску зависност услед ефеката електрон-фонон интеракције. Добијање ових резултата је било изазовно из више разлога. Добро је познато да локалне апроксимације у оквиру теорије функционала густине не дају добар енергијски процеп. Стога је за прорачун примењен сложенији приступ заснован на хибридном функционалу. Због присуства тешког елемента као што је олово неопходно је било и да се урачунавају ефекти спин-орбиталне интеракције. Додатна отежавајућа околност у односу на конвенционалне полупроводнике је чињеница да су ови материјали релативно меки у смислу да су осцилације атома у односу на равнотежни положај веома значајне, па се и тај ефекат мора узети у обзир при прорачуну електронске структуре. Кад су у питању фонони, ова чињеница је узета у обзир тако што је коришћена самоконзистентна фононска метода при одређивању фононског спектра. Приказани су резултати за температурску зависност за ширење и ренормализацију електронских нивоа коришћењем Ален-Хајне-Кардона теорије уз помоћ метода који смо развили, а који је базиран на Мигдаловој самоконзистентној апроксимацији. Представљени резултати показују да се процеп и његова температурска зависност добро слажу са експериментом.

У петом поглављу, одређене су енергије стања у перовскитним наноструктурама користећи резултате из претходна два поглавља. Описан је Барт-Форманов метод анвелопних функција и показано је да метод анвелопних функција даје сличне резултате као теорија функционала густине у случају квантних јама, чиме је потврђена исправност овог метода. Коначно је приказана израчуната температурска зависност енергетског процепца перовскитних јама, жица и тачака за различите димензије ових структура.

У шестом, закључном поглављу, укратко су сумирани резултати представљени у тези, док су 4 додатка дати додатни математички детаљи и графици.

Chapter 1 of the dissertation provides an overview of the significance of halide perovskite materials and their nanostructures, along with a review of their applications in solar cells and light-emitting diodes (LEDs).

Chapter 2 outlines the theoretical foundations of the methods used in the subsequent chapters of the thesis. It begins with a review of basic concepts related to crystalline materials. This is followed by an explanation of the effective mass model and the $k \cdot p$ model for describing the electronic structure of materials. Next, density functional theory (DFT) is introduced as a method for calculating electronic structure. Methods for describing the phonon structure and electron-phonon interactions are also presented. The chapter concludes with a brief overview of concepts from group theory used throughout the dissertation.

Chapter 3 presents the development of a method for constructing a $k \cdot p$ Hamiltonian starting from the electronic structure obtained via *ab initio* calculations. Based on DFT calculations, wave functions and energy levels of the electronic states are obtained. All parameters appearing in the $k \cdot p$ Hamiltonian can be directly calculated from these energy levels and from the matrix elements of the momentum operator between the corresponding wave functions. However, the resulting Hamiltonian typically takes a very complex form, differing from the conventional symmetry-adapted forms found in the literature. To

obtain a symmetrized form, a unitary transformation is applied to the set of wave functions within each degenerate subspace. This procedure is successfully demonstrated for the CdSe material with a zinc blende crystal structure.

Chapter 4 presents the methodology and results for the electronic structure of CsPbX_3 perovskite materials, including its temperature dependence arising from electron-phonon interaction effects. Obtaining these results was challenging for several reasons. It is well known that local approximations within DFT do not yield accurate band gaps. Therefore, a more sophisticated approach based on hybrid functionals was used. Due to the presence of a heavy element such as lead, it was also necessary to include spin-orbit coupling effects. An additional challenge, compared to conventional semiconductors, is that these materials are relatively "soft," meaning that atomic vibrations around equilibrium positions are significant and must be taken into account in electronic structure calculations. Regarding phonons, this was addressed using the self-consistent phonon method to determine the phonon spectrum. Results are presented for the temperature-dependent broadening and renormalization of electronic levels, obtained using Allen-Heine-Cardona theory via a method we developed based on Migdal's self-consistent approximation. The results show that the calculated band gap and its temperature dependence are in good agreement with experimental data.

Chapter 5 determines the electronic state energies in perovskite nanostructures using the results from the previous two chapters. The Burt-Foreman envelope function method is described, and it is shown that this method yields results comparable to those obtained from DFT in the case of quantum wells, thereby validating its accuracy. Finally, the calculated temperature dependence of the band gap in perovskite wells, wires, and dots is presented for various structure sizes.

Chapter 6, the concluding chapter, summarizes the main results presented in the dissertation. Four appendices provide additional mathematical details and graphical data.

ВРЕДНОВАЊЕ РЕЗУЛТАТА ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

Ниво остваривања постављених циљева из пријаве докторске дисертације (до 200 речи)

Главни циљ истраживања у оквиру ове дисертације је био да се добију параметри Хамилтонијана који описују перовскитне нанокристале, да се разумеју електронска стања у перовскитним нанокристалима и да се одреди зависност енергије емисије од димензија нанокристала. Приликом пријаве докторске дисертације, реализација овог главног циља истраживања је планирана кроз остваривање следећих краткорочних циљева: 1) развијање метода којим ће се полазећи од електронске структуре кристала добијене у *ab-initio* прорачуну конструисати *k-p* Хамилтонијан; 2) прецизно израчунавање електронске структуре перовскитних материјала CsPbX_3 укључујући и њену температурску зависност услед ефеката електрон-фнон интеракције; 3) одређивање електронских стања у перовскитним нанокристалима и на основу тога одређивање зависности енергије емисије од димензије нанокристала.

Комисија констатује да су сви наведени циљеви у потпуности испуњени. Развијен је метод којим се полазећи од *ab-initio* прорачуна може конструисати *k-p* Хамилтонијан, што је приказано у поглављу 3 тезе и у раду [1]. Затим је успешно одређена температурска зависност електронске структуре перовскитних материјала CsPbX_3 , што је представљено у поглављу 4 тезе и у раду [2]. Коначно су одређена и електронска стања у перовскитним квантним јамама, квантним жицама и квантним тачкама, као и зависност енергије емисије светлости од димензије ових наноструктура, као што је описано у поглављу 5 тезе и у раду [3].

The main objective of the research conducted in this dissertation was to determine the parameters of the Hamiltonian describing perovskite nanocrystals, to gain an understanding of the electronic states in perovskite nanocrystals, and to establish the dependence of emission energy on nanocrystal size. At the time of the dissertation proposal, the realization of this main research objective was planned through the achievement of the following short-term goals: 1) development of a method for constructing a *k-p* Hamiltonian based on the electronic structure obtained from *ab initio* calculations; 2) accurate calculation of the electronic structure of CsPbX_3 perovskite materials, including its temperature dependence due to electron-phonon interaction effects; and 3) determination of the electronic states in perovskite nanocrystals and, based on that, evaluation of the size dependence of their emission energy.

The committee concludes that all of the stated objectives have been fully achieved. A method for constructing a *k-p* Hamiltonian from *ab initio* calculations has been developed, as demonstrated in Chapter 3 of the dissertation and in publication [1]. Furthermore, the temperature dependence of the electronic structure of CsPbX_3 perovskite materials has been successfully determined, as presented in Chapter 4 of the dissertation and in publication [2]. Finally, the electronic states in perovskite quantum wells, quantum wires, and quantum dots have been determined, as well as the dependence of their emission energy on nanostructure size, as described in Chapter 5 of the dissertation and in publication [3].

Вредновање значаја и научног доприноса резултата дисертације (до 200 речи)

У оквиру докторске дисертације добијени су Хамилтонијани који описују перовскитне нанокристале и њихових електронских стања у зависности од димензија наноструктура. За ту сврху развијен је метод који конструира *k-p* Хамилтонијане полазећи од добијених електронских структура из *ab-initio* прорачуна као и процедура за одређивање

тих Хамилтонијана у симетријски адаптиран облик. Тај метод је демонстриран на кристалима као и нанокристалима у облику квантних јама за случај CdSe материјала.

Такође, израчуната је температурска зависност електронске структуре CsPbX₃ перовскитних кристала коришћењем Аллен-Хајне-Кардона теорије а за ту сврху, развијен је метод који је базиран на Мигдаловој самоконзистентној апроксимацији. Коначно, коришћењем методологије за добијање симетријски адаптираних k-p Хамилтонијана, као и температурске зависности електронских нивоа CsPbX₃ кристала, добијена су електронска стања њихових нанокристала у облику квантних јама, жица и тачака.

Овако добијени резултати доприносе бољем разумевању електронских својства перовскитних нанокристала и могу послужити за даље истраживање њихових оптичких особина. Методи који су развијени за потребе дисертације се лако могу прилагодити и на друге полупроводничке кристале и нанокристале. Сви ови резултати и методи могу наћи примену у актуелним истраживањима фотоволтаика и њиховим практичним применама.

Within the doctoral dissertation, Hamiltonians describing perovskite nanocrystals and their electronic states as a function of nanostructure size have been obtained. For this purpose, a method was developed to construct k-p Hamiltonians based on electronic structures derived from ab initio calculations, as well as a procedure for transforming these Hamiltonians into a symmetry-adapted form. This method was demonstrated on both bulk crystals and nanocrystals in the form of quantum wells for the case of CdSe material.

In addition, the temperature dependence of the electronic structure of CsPbX₃ perovskite crystals was calculated using the Allen-Heine-Cardona theory. To this end, a method based on Migdal's self-consistent approximation was developed. Finally, by using the methodology for obtaining symmetry-adapted k-p Hamiltonians and the temperature dependence of electronic levels in CsPbX₃ crystals, the electronic states of their nanocrystals—configured as quantum wells, wires, and dots—were determined.

The results obtained contribute to a deeper understanding of the electronic properties of perovskite nanocrystals and may serve as a basis for further research into their optical characteristics. The methods developed for the purposes of this dissertation can be readily adapted to other semiconductor crystals and nanocrystals. All these results and methods are applicable to current research in photovoltaics and their practical implementations.

Оцена самосталности научног рада кандидата (до 100 речи)

Током израде дисертације, кандидат Милан Јоцић показао је висок ниво самосталности у свим сегментима истраживачког рада, укључујући и рад на рачунарским симулацијама, писање сопствених рачунарских кодова, дискусију и анализу резултата, литерарни преглед, писање научних радова, као и саме дисертације. Самосталност је и формално потврђена публикавањем претходно наведених радова, на којима је кандидат уједно и првopotписани аутор.

During the preparation of the dissertation, the candidate, Milan Jocić, demonstrated a high level of independence in all aspects of the research work, including conducting computer simulations, writing custom computational codes, discussing and analyzing results, performing literature reviews, and writing scientific papers as well as the dissertation itself. This independence is also formally evidenced by the publication of the aforementioned papers, in which the candidate is listed as the first author.

ЗАКЉУЧАК (до 100 речи)

Докторска дисертација под насловом „Електронска својства перовскитних нанокристала“, кандидата Милана Јоцића, представља оригинални научни рад. Резултати добијени у оквиру дисертације верификовани су публикавањем радова који су у потпуности из најуже области дисертације: два рада категорије M21 и један рад категорије M52.

Комисија предлаже Наставно-научном већу Природно-математичког факултета Универзитета у Нишу и Научно-стручном већу за природно-математичке науке Универзитета у Нишу да се кандидату Милану Јоцићу одобри одбрана докторске дисертације под насловом „Електронска својства перовскитних нанокристала“.

The doctoral dissertation entitled "Electronic properties of perovskite nanocrystals", by candidate Milan Jocić, represents an original scientific contribution. The results obtained within the dissertation have been validated by the publication of papers fully within the core area of the dissertation: two papers classified as M21 and one paper classified as M52.

The committee proposes to the Teaching Scientific Council of the Faculty of Sciences and Mathematics, University of Niš, and the Scientific Expert Council for Natural and Mathematical Sciences, University of Niš, to approve candidate Milan Jocić's defense of the doctoral dissertation entitled "Electronic properties of perovskite nanocrystals".

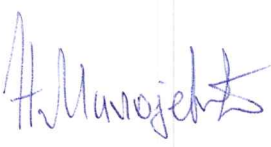
КОМИСИЈА

Број одлуке Научно-стручног већа за
природно математичке науке о именовању
Комисије

817-01-05/25-5

Датум именовања Комисије

12.06.2025.

Р. бр.	Име и презиме, звање		Потпис
1.	Иван Манчев / Ivan Mančev	председник	
	Физика / Physics	Природно-математички факултет у Нишу, Универзитет у Нишу Faculty of Sciences and Mathematics, University of Niš	
	(Научна област)	(Установа у којој је запослен)	
2.	Ненад Вукмировић / Nenad Vukmirović	ментор, члан	
	Физика / Physics	Институт за физику у Београду, Универзитет у Београду Institute of Physics Belgrade, University of Belgrade	
	(Научна област)	(Установа у којој је запослен)	
3.	Ненад Милојевић / Nenad Milojević	ментор, члан	
	Физика / Physics	Природно-математички факултет у Нишу, Универзитет у Нишу Faculty of Sciences and Mathematics, University of Niš	
	(Научна област)	(Установа у којој је запослен)	

Датум и место:

Београд, 04.07.2025.

Ниш, 08.07.2025.