

НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ ФИЗИЧКОГ ФАКУЛТЕТА УНИВЕРЗИТЕТА У БЕОГРАДУ

Пошто смо на X седници Наставно-научног већа Физичког факултета Универзитета у Београду одржаној 20. септембра 2023. године одређени за чланове Комисије за преглед и оцену докторске дисертације „**Spectral functions and mobility of the Holstein polaron**” (наслов на српском језику: „**Спектралне функције и покретљивост Холштајновог поларона**”) из научне области Физика кондензоване материје, коју је кандидат Петар Митрић предао Физичком факултету у Београду, подносимо следећи

ИЗВЕШТАЈ

1. Основни подаци о кандидату

1.1. Биографски подаци

Петар Митрић је рођен 23. августа 1995. године у Београду. Основне студије на Физичком факултету Универзитета у Београду, смер Теоријска и експериментална физика, уписао је 2014. године. Добио је награду „Проф. др Ђорђе Живановић” за једног од два најбоља студента треће године, као и награду Студент генерације на крају студија. Дипломирао је 2018. године са просечном оценом 9,97. На истом факултету завршио је мастер студије 2019. године, са просечном оценом 10,00. Мастер рад „Канонска структура телепаралелне формулације опште теорије релативности“ урадио је под руководством др Бранислава Цветковића, у сарадњи са др Милутином Благојевићем.

Докторске студије на Физичком факултету Универзитета у Београду Петар Митрић је уписао 2019. године, на смеру Физика кондензоване материје и статистичка физика, под менторством др Дарка Танасковића. Научно-истраживачки рад се одвија на Института за физику у Београду где је Петар Митрић запослен од 2019. године као истраживач приправник, односно истраживач сарадник.

1.2. Научна активност

Научноистраживачки рад Петра Митрића је у области теоријске физике кондензоване материје и одвија се у оквиру Лабораторије за примену рачунара у науци Националног центра изузетних вредности за изучавање комплексних система под менторством др Дарка Танасковића. Главна тема рада је прорачун спектралних функција и проводности у полупроводницима са израженом електрон-фонон интеракцијом. Решење овог важног и старог проблема у физици кондензоване материје је добро утврђено само у режиму слабе електрон-фонон интеракције. Развој нових аналитичких и нумеричких метода је обновио интересовање научне заједнице, а такође је померио фокус и на проучавање последица електрон-фонон интеракције у реалним материјалима. У оквиру рада на докторату, Петар Митрић је проучавао електрон-фонон интеракцију на Холштајновом моделу који описује кратकोдетну интеракцију електрона са оптичким фононима и који може да се користи при опису молекуларних органских полупроводника. Рад кандидата је садржао развој више аналитичких метода и њихову нумеричку имплементацију са циљем да се добију прецизне спектралне функције као и да се израчуна (оптичка) проводност у што ширем простору параметара. Главни методи коришћени у раду су динамичка теорија средњег поља и метод

кумулянтног развоја (као алтернатива нашироко коришћеној Дајсоновој једначини). У режимима где је то било могуће, за поређење су коришћени нумерички егзактни резултати Вељка Јанковића добијени помоћи метода хијерархијских једначина кретања, као и резултати Ненада Вукмировића и Сузане Миладић добијени квантним Монте Карло методом.

У досадашњем раду Петар Митрић је објавио три рада у међународним часописима: један рад категорије M21 (ИФ=8.6) и два категорије M22 (ИФ=3.7).

2. Опис предатог рада

2.1. Основни подаци

Докторска дисертација Петра Митрића под називом „Spectral functions and mobility of the Holstein polaron” (наслов на српском језику: „Спектралне функције и покретљивост Холштајновог поларона”) је написана на енглеском језику на 229 страна, не рачунајући насловну страну, захвалнице, сажетак, садржај, листе слика, табела и скраћеница, као и биографију аутора. Теза је подељена у 3 дела који садрже укупно 11 поглавља, као и 6 додатака. У тексту се налази 67 слика и наведено је 137 референци.

Дисертација је урађена под менторством др Дарка Танасковића, научног саветника запосленог на Институту за физику у Београду. Он испуњава све услове прописане за менторство и именован је за ментора одлуком Наставно-научног већа Физичког факултета Универзитета у Београду на седници одржаној 14. септембра 2022. године. Резултати приказани у тези су објављени у једном раду у часопису Physical Review Letters (рад [1] из списка радова) и једном раду у часопису Physical Review B (рад [2] из списка радова).

2.2. Предмет и циљ рада

Петар Митрић се у свом научном раду током докторских студија бавио проучавањем електронске структуре и транспортних особина у теоријским моделима полупроводника. Овај правац истраживања има за циљ да одговори на нека од базичних питања из теорије јаке електрон-фонон интеракције, а у ширем контексту је значајан због потенцијалне примене при дизајнирању нових и оптимизацији постојећих полупроводничких компоненти. За реалне материјале, поуздани прорачун мерљивих физичких величина попут покретљивости наелектрисања је тренутно могућ само у режиму слабе електрон-фонон интеракције, у којем је пертурбативни приступ оправдан. Међутим, у многим реалним полупроводницима електрон-фонон интеракција је сувише јака да би овакав приступ био исправан и због тога је неопходно развијање нових теоријских, односно нумеричких метода. У свеобухватној анализи опсега важења различитих метода и њиховој нумеричкој оптимизацији, полази се од поједностављених моделних хамилтонијана.

Централна тема истраживања кандидата заснива се на Холштајновом моделу који представља теоријску идеализацију слабо допираних полупроводника са локалном електрон-фонон интеракцијом. Холштајнов модел је уведен 1959. године и проучаван је до сада у великом броју радова коришћењем различитих аналитичких, а нарочито нумеричких метода. И поред тога, ни за овако поједностављен модел није до сада постојало у литератури задовољавајуће решење у целом опсегу параметара. Занимљиво је да су тек последњих неколико година почели да се појављују прецизни, али изузетно нумерички захтевни резултати за спектралне функције на коначним температурама. Главни циљ дисертације је да се развију нумерички ефикасни апроксимативни

методи који ће омогућити да се прецизно израчунају спектралне функције и покретљивост Холштајновог поларона у свим релевантним режимима параметара.

2.3. Публикације чији су резултати приказани у дисертацији

У овој докторској дисертацији су представљени резултати два рада, и то једног рада објављеног у часопису категорије M21 (ИФ=8.6) и једног рада објављеног у часопису категорије M22 (ИФ=3.7):

- [1] P. Mitrić, V. Janković, N. Vukmirović, and D. Tanasković, *Spectral Functions of the Holstein Polaron: Exact and Approximate Solutions*, Phys. Rev. Lett. **129**, 096401 (2022).
M21, DOI: 10.1103/PhysRevLett.129.096401, ISSN: 1079-7114; ИФ=8.6
- [2] P. Mitrić, V. Janković, N. Vukmirović, and D. Tanasković, *Cumulant Expansion in the Holstein Model: Spectral Functions and Mobility*, Phys. Rev. B **107**, 125165 (2023).
M22, DOI: 10.1103/PhysRevB.107.125165, ISSN: 2469-9950, ИФ=3.7

2.4. Преглед научних резултата изложених у дисертацији

Ова докторска дисертација садржи 3 дела, закључак и додатке.

Први део је увод који се састоји из 2 поглавља. У првом поглављу је дефинисан Хамилтонијан који описује електрон-фонон интеракцију у општем случају, уведен је концепт поларона и дефинисан је Холштајнов модел. Друго поглавље садржи кратак преглед дефиниција једночестичних корелационих функција и познатих резултата у лimesу слабе електрон-фонон интеракције, као и у атомском лimesу.

Други део тезе је посвећен спектралним функцијама и другим једночестичним особинама. Подељен је у 3 поглавља. Прво поглавље садржи детаљан приказ динамичке теорије средњег поља (DMFT) која је једна од главних метода коришћених у раду. DMFT је раније већ примењиван на Холштајнов модел, али само за Бете решетку у лimesу бесконачне димензије. У овом поглављу су изведени аналитички резултати за једначину самоусаглашености у једној и две димензије, а приказана је и стабилна нумеричка имплементација која је применљива у произвољном броју димензија. Ово је омогућило веома ефикасно нумеричко решавање решаваче DMFT једначина у целом опсегу параметара. Резултати су приказани у другом поглављу и они представљају основу публикације [1] из списка радова. Главни резултат и закључак овог дела рада је да DMFT даје изузетно добре резултате за енергију основног стања поларона, ефективну масу, као и спектралне функције у широком опсегу температура, јачина интеракције и фреквенција осцилација кристалне решетке, без обзира на број димензија система. Поред свог непосредног значаја за овај више од пола века стар проблем, изложени резултати представљају значајну полазну основу за развијање нумеричких метода применљивих у реалним материјалима.

Треће поглавље садржи опис метода кумулантног развоја и детаље његове имплементације за одређивање спектралних функција у Холштајновом моделу. Метод кумулантног развоја је апроксимативни метод, посебно погодан за примену у различитим моделима, као и у реалним материјалима. Тачан опсег важења овог метода до сада је био непознат због недовољног броја поузданих резултата са којима би могао бити поређен. Наведени DMFT резултати су отворили могућност утврђивања применљивости метода кумулантног развоја на примеру Холштајновог модела.

Развијена је и детаљно приказана нумеричка процедура за ефикасну примену метода кумулантног развоја у Холштајновом моделу и извршено је детаљно поређење са DMFT резултатима, као и резултатима добијеним у (самоусаглашеној) Мигдаловој апроксимацији (SCMA), у режимима слабе, умерене и јаке електрон-фонон интеракције. Показано је одлично слагање између ова три метода при слабој интеракцији до ренормализације масе од отприлике $m/m^*=0.9$. При умереној електрон-фонон интеракцији која одговара ренормализацији масе $m/m^*=0.5$ метод кумулантног развоја доста добро описује квазичестични и први сателитски пик у спектралној функцији, нешто боље него самоусаглашена Мигдалова апроксимација. При јачим интеракцијама метод кумулантног развоја није применљив. У овог поглављу је изведен и приказан већи број аналитичких резултата, попут провере сумационих у поменутих апроксимативним методама. Резултати приказани у трећем поглављу представљају основу публикације [2] из списка радова.

Трећи део тезе се састоји од 6 поглавља и посвећен је транспортним особинама, односно прорачуну покретљивости електрона (поларона) и оптичке проводности. Прво и друго поглавље садржи концизан приказ Кубоове теорије линеарног одзива и извођење разних корисних релација које повезују оптичку проводност и струја-струја корелационе функције у реалном и имагинарном времену. Уведен је појам нашироко коришћене мехурасте апроксимације за оптичку проводност и вертексних корекција. Познавање једночестичних спектралних функција је довољно за израчунавање проводности у мехурастој апроксимацији. Резултати добијени апроксимативним методама (DMFT, SCMA, кумулантни развој) су приказани у трећем поглављу. Аналитички је показана степена зависност покретљивости од температуре на виском температурама. Ови резултати су такође приказани у раду [2].

Преостала три поглавља су посвећена вертексним корекцијама у Холштајновом моделу. Најпре је у четвртном поглављу изведен Вордов идентитет на коначној температури, а потом је у петом поглављу овај идентитет искоришћен да би се показало да вертексне корекције не дају допринос проводности у лимесу слабе електрон-електрон интеракције, као и у атомском лимесу. Нумерички резултати су приказани у шестом поглављу, а посебна пажња је посвећена (адијабатском) лимесу мале фононске фреквенце где је приказано поређење са корелационим функцијама у Андерсоновом моделу са статичком неуређеношћу.

Додатак се састоји из 6 делова. Приказани су детаљи нумеричке имплементације директне и инверзне Фуријеове трансформације Гринове функције, као и интеграције брзоосцилујућих функција. Трећи додатак даје детаљни приказ оператора струје у континуалном случају и на решетки. Четврти додатак садржи извођење израза за инверзију тридијагоналне матрице. У петом додатку је приказано неколико општих операторских идентитета, а у шестом додатак је приказано поређење нумеричких DMFT резултата за спектрална сумациона правила са аналитичким резултатима.

3. Списак публикација кандидата

У својој досадашњој каријери, кандидат је објавио један рад у часопису категорије М21 (ИФ=8.6) и два рада у часопису категорије М22 (ИФ=3.7):

- [1] P. Mitrić, V. Janković, N. Vukmirović, and D. Tanasković, *Spectral Functions of the Holstein Polaron: Exact and Approximate Solutions*, Phys. Rev. Lett. **129**, 096401 (2022).
M21, DOI: 10.1103/PhysRevLett.129.096401, ISSN: 1079-7114; ИФ=8.6
- [2] P. Mitrić, V. Janković, N. Vukmirović, and D. Tanasković, *Cumulant Expansion in the Holstein Model: Spectral Functions and Mobility*, Phys. Rev. B **107**, 125165 (2023).
M22, DOI: 10.1103/PhysRevB.107.125165, ISSN: 2469-9950, ИФ=3.7
- [3] C. Martin, V. Martinez, M. Opačić, S. Djurdjić-Mijin, P. Mitrić, A. Umićević, A. Poudel, I. Sydoryk, W. Ren, R. M. Martin, D. B. Tanner, N. Lazarević, C. Petrovic, and D. Tanasković, *Optical Conductivity and Vibrational Spectra of the Narrow-gap Semiconductor FeGa₃*, Phys. Rev. B **165151**, 165151 (2023)
M22, DOI: 10.1103/PhysRevB.107.165151, ISSN: 2469-9950, ИФ=3.7

4. Закључак

На основу изложеног, Комисија закључује да резултати кандидата Петра Митрића приказани у оквиру ове докторске дисертације представљају изузетно оригиналан и значајан научни допринос у области физике кондензоване материје. Из области дисертације кандидат има два објављена рада, од чега један у врхунском (M21, ИФ=8.6) и један у истакнутом међународном часопису (M22, ИФ=3.7). Сходно томе, комисија предлаже Наставно-научном већу Физичког факултета Универзитета у Београду да одобри јавну одбрану докторске дисертације

Spectral functions and mobility of the Holstein polaron
(Спектралне функције и покретљивост Холштајновог поларона)

У Београду, 22. 9. 2023.

проф. др Ђорђе Спасојевић
редовни професор
Физички факултет, Универзитет у Београду

проф. др Божидар Николић
ванредни професор
Физички факултет, Универзитет у Београду

др Антун Балаж
научни саветник
Институт за физику у Београду, Универзитет у Београду