

ПРИМЉЕНО:		11. 03. 2026	
Ред.јед.	б р о ј	Арх.шифра	Прилог
0801	37211		

Научном већу Института за физику у Београду

Предлог за Студентску награду Института за физику у Београду

За Студентску награду Института за физику у Београду предлагем др Милана Јоцића за докторску дисертацију *Electronic properties of perovskite nanocrystals* (Електронска својства перовскитних нанокристала), одбраћену 30. септембра 2025. године на Природно-математичком факултету Универзитета у Нишу. Уз ово образложење прилажем и докторску дисертацију, стручну биографију кандидата, списак његових објављених радова и податке о цитираности из база Scopus и Web of Science.

Образложење:

Тема истраживања представљеног у тези др Милана Јоцића су електронска својства перовскитних нанокристала. Халидни перовскитни материјали су изазвали велику пажњу научне заједнице у последњих петнаестак година јер се открило да имају изузетне оптоелектронске особине. Нагли раст интересовања за истраживање ових материјала је започео 2012. године када су пријављене соларне ћелије које су направљене јефтним поступком прераде у раствору које су имале ефикасност преко 10%. Даљи развој ових материјала у наредних неколико година је довео до развоја соларних ћелија са ефикасношћу преко 20%. Након развоја халидних перовскитних материјала, природно је дошло и до развоја наноструктура на бази тих материјала. Посебну пажњу су притом привукли нанокристали на бази неорганских халидних перовскитних материјала. Иако су халидни перовскитни материјали детаљно истраживани са експерименталне стране током претходних година, остало је пуно отворених питања за теоријска истраживања. Теоријска истраживања су углавном била фокусирана на кристалне перовскитне материјале и била су базирана на примени метода из првих принципа (ab-initio) за прорачун електронске структуре материјала. Такви методи се не могу у пракси применити на нанокристале који садрже велики број атома и стога се одговарајући прорачун не може извршити у разумном времену. У оквиру дисертације кандидата су развијени или прилагођени методи који омогућавају истраживање електронских стања у перовскитним нанокристалима.

Најпре је развијен метод којим се полазећи од електронске структуре кристала добијене у ab-initio прорачуну конструише k - p Хамилтонијан. Сви параметри који се јављају у k - 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 - p Хамилтонијан би имао изузетно компликован облик који се разликује од конвенционалних симетријски адаптираних облика из литературе. Да би се k - p Хамилтонијан довео у симетризовану форму, примењена је унитарна трансформација на скупу таласних функција из сваког простора дегенерисаних електронских стања, што је поступак који је оригинално развијен у овој тези. У целини, овај поступак је повезао k - p теорије развијане почев од 1950их година са модерним ab-initio прорачунима. Детаљан опис ове методе је приказан у поглављу 3 тезе и у раду M21[3] из списка публикација објављеном у часопису Physical Review B. Занимљиво је да је три године касније, друга истраживачка група, независно дошла до развоја практично исте методе (видети рад <https://scipost.org/10.21468/SciPostPhysCodeb.25>). Током рада на овом делу истраживања кандидат је самостално развио рачунарске кодове који полазећи од излаза прорачуна стандардним кодовима за електронску структуру (као што је Quantum Espresso) конструишу k - p Хамилтонијан у симетризованој форми.

Након тога је развијен поступак за израчунавање електронске структуре неорганских перовскитних материјала. Испоставља се да код ових материјала постоји низ ефеката који

чине њихов прорачун знатно сложенијим него кад су у питању конвенционални полупроводници као што је GaAs или Si. Код перовскита је веома изражена температурна зависност електронске структуре, па је за њен прорачун потребно урачунавати ефекте фонона и електрон-фонон интеракције. Додатно, најчешће разматране кубичне структуре су стабилне на вишим температурама, али не и на нултој. Зато стандардан прорачун фонона у оквиру DFPT (пертурбациона теорија функционала густине) и хармонијске апроксимације даје нестабилне фононске моде, па је за њихово разматрање потребно узимати у обзир и анхармонијске ефекте и ефекте температуре. Утицај електрон-фонон интеракције на електронску структуру се у литератури стандардно разматра коришћењем Ален-Хајне-Кардона теорије, која је заснована на обичном пертурбативном третману електрон-фонон интеракције. Овде се испоставило да такав приступ није добар, већ је било потребно користити само-конзистентну Мигдалову апроксимацију која истовремено узима у обзир и ефекте ренормализације и ширења електронских стања, што дотад није рађено. Кандидат је предложио оригиналну методу која омогућава рачунски ефикасан прорачун у оквиру оваквог поступка. Притом је развио рачунарски код који полазећи од резултата DFPT прорачуна програмом Abinit рачуна електронске спектралне функције, а тиме и ефекте ренормализације енергетских нивоа и њихово ширење. Добијени резултати су показали добро слагање са температурном зависношћу енергетског процепа код материјала за које су доступни експериментални подаци. Ови резултати су описани у поглављу 4 тезе, као и у раду M21[1] из списка публикација, објављеном у часопису Physical Chemistry Chemical Physics.

Коначно, у петом поглављу тезе, одређене су енергије стања у перовскитним наноструктурама користећи методе и резултате из претходна два поглавља. Приказана је израчуната температурска зависност енергетског процепа перовскитних јама, жица и тачака за различите димензије ових структура. Део резултата из овог поглавља је објављен у раду M52[1] из списка публикација, у складу са захтевом Универзитета у Нишу да се један рад објави у часопису који издаје тај универзитет.

Сама тезе је написана јасно, прегледно и систематично са одговарајућим уводом у област истраживања. Желим посебно да истакнем да резултати добијени у овој тези нису могли бити добијени коришћењем готових рачунарских кодова, већ је било потребно уложити значајан труд у развој метода и одговарајућих рачунарских кодова.

Кандидат задовољава и све формалне услове да буде предложен за Студентску награду у складу са Правилником о наградама: теза је одбрањена током претходне календарске године (члан 12, став 1), истраживање је у целости спроведено на Институту за физику у Београду (члан 1, став 2 и члан 12, став 3) уз коришћење суперрачунарског постројења PARADOX, а резултати истраживања су представљени на два редовна семинара у институту [SCL семинари 2. октобра 2025 (<https://www.scl.rs/news/1413-scl-seminar-by-milan-jocic-2025>) и 10. децембра 2020. (<https://www.scl.rs/news/1247-scl-online-seminar-by-milan-jocic>), члан 1, став 2 и члан 12, став 3].

С обзиром на све наведено, са задовољством предлажем др Милана Јоцића за Студентску награду Института за физику у Београду.

У Београду,
11. март 2026.

др Ненад Вукмировић
научни саветник
Институт за физику у Београду

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 Милана Јоцића за докторску дисертацију *Electronic properties of perovskite nanocrystals* (Електронска својства перовскитних нанокристала), одбраћену 30. септембра 2025. године на Природно-математичком факултету Универзитета у Нишу. Уз ово образложење прилажем и докторску дисертацију, стручну биографију кандидата, списак његових објављених радова и податке о цитираниости из база Scopus и Web of Science.

Образложење:

Тема истраживања представљеног у тези др Милана Јоцића су електронска својства перовскитних нанокристала. Халидни перовскитни материјали су изазвали велику пажњу научне заједнице у последњих петнаестак година јер се открило да имају изузетне оптоелектронске особине. Нагли раст интересовања за истраживање ових материјала је започео 2012. године када су пријављене соларне ћелије које су направљене јефтиним поступком прераде у раствору које су имале ефикасност преко 10%. Даљи развој ових материјала у наредних неколико година је довео до развоја соларних ћелија са ефикасношћу преко 20%. Након развоја халидних перовскитних материјала, природно је дошло и до развоја наноструктура на бази тих материјала. Посебну пажњу су притом привукли нанокристали на бази неорганских халидних перовскитних материјала. Иако су халидни перовскитни материјали детаљно истраживани са експерименталне стране током претходних година, остало је пуно отворених питања за теоријска истраживања. Теоријска истраживања су углавном била фокусирана на кристалне перовскитне материјале и била су базирана на примени метода из првих принципа (*ab-initio*) за прорачун електронске структуре материјала. Такви методи се не могу у пракси применити на нанокристале који садрже велики број атома и стога се одговарајући прорачун не може извршити у разумном времену. У оквиру дисертације кандидата су развијени или прилагођени методи који омогућавају истраживање електронских стања у перовскитним нанокристалима.

Најпре је развијен метод којим се полазећи од електронске структуре кристала добијене у *ab-initio* прорачуну конструише k - p Хамилтонијан. Сви параметри који се јављају у k - 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 - p Хамилтонијан би имао изузетно компликован облик који се разликује од конвенционалних симетријски адаптираних облика из литературе. Да би се k - p Хамилтонијан довео у симетризовану форму, примењена је унитарна трансформација на скупу таласних функција из сваког простора дегенерисаних електронских стања, што је поступак који је оригинално развијен у овој тези. У целини, овај поступак је повезао k - p теорије развијане почев од 1950их година са модерним *ab-initio* прорачунима. Детаљан опис ове методе је приказан у поглављу 3 тезе и у раду M21[3] из списка публикација објављеном у часопису Physical Review B. Занимљиво је да је три године касније, друга истраживачка група, независно дошла до развоја практично исте методе (видети рад <https://scipost.org/10.21468/SciPostPhysCodeb.25>). Током рада на овом делу истраживања кандидат је самостално развио рачунарске кодове који полазећи од излаза прорачуна стандардним кодовима за електронску структуру (као што је Quantum Espresso) конструишу k - p Хамилтонијан у симетризованој форми.

Након тога је развијен поступак за израчунавање електронске структуре неорганских перовскитних материјала. Испоставља се да код ових материјала постоји низ ефеката који

чине њихов прорачун знатно сложенијим него кад су у питању конвенционални полупроводници као што је GaAs или Si. Код перовскита је веома изражена температурна зависност електронске структуре, па је за њен прорачун потребно урачунавати ефекте фонона и електрон-фонон интеракције. Додатно, најчешће разматране кубичне структуре су стабилне на вишим температурама, али не и на нултој. Зато стандардан прорачун фонона у оквиру DFPT (пертурбациона теорија функционала густине) и хармонијске апроксимације даје нестабилне фононске моде, па је за њихово разматрање потребно узимати у обзир и анхармонијске ефекте и ефекте температуре. Утицај електрон-фонон интеракције на електронску структуру се у литератури стандардно разматра коришћењем Ален-Хајне-Кардона теорије, која је заснована на обичном пертурбативном третману електрон-фонон интеракције. Овде се испоставило да такав приступ није добар, већ је било потребно користити само-конзистентну Мигдалову апроксимацију која истовремено узима у обзир и ефекте ренормализације и ширења електронских стања, што дотад није рађено. Кандидат је предложио оригиналну методу која омогућава рачунски ефикасан прорачун у оквиру оваквог поступка. Притом је развио рачунарски код који полазећи од резултата DFPT прорачуна програмом Abinit рачуна електронске спектралне функције, а тиме и ефекте ренормализације енергетских нивоа и њихово ширење. Добијени резултати су показали добро слагање са температурном зависношћу енергетског процепа код материјала за које су доступни експериментални подаци. Ови резултати су описани у поглављу 4 тезе, као и у раду M21[1] из списка публикација, објављеном у часопису Physical Chemistry Chemical Physics.

Коначно, у петом поглављу тезе, одређене су енергије стања у перовскитним наноструктурама користећи методе и резултате из претходна два поглавља. Приказана је израчуната температурска зависност енергетског процепа перовскитних јама, жица и тачака за различите димензије ових структура. Део резултата из овог поглавља је објављен у раду M52[1] из списка публикација, у складу са захтевом Универзитета у Нишу да се један рад објави у часопису који издаје тај универзитет.

Сама теза је написана јасно, прегледно и систематично са одговарајућим уводом у област истраживања. Желим посебно да истакнем да резултати добијени у овој тези нису могли бити добијени коришћењем готових рачунарских кодова, већ је било потребно уложити значајан труд у развој метода и одговарајућих рачунарских кодова.

Кандидат задовољава и све формалне услове да буде предложен за Студентску награду у складу са Правилником о наградама: теза је одбрањена током претходне календарске године (члан 12, став 1), истраживање је у целости спроведено на Институту за физику у Београду (члан 1, став 2 и члан 12, став 3) уз коришћење суперрачунарског постројења PARADOX, а резултати истраживања су представљени на два редовна семинара у институту [SCL семинари 2. октобра 2025 (<https://www.scl.rs/news/1413-scl-seminar-by-milan-jocic-2025>) и 10. децембра 2020. (<https://www.scl.rs/news/1247-scl-online-seminar-by-milan-jocic>), члан 1, став 2 и члан 12, став 3].

С обзиром на све наведено, са задовољством предлажем др Милана Јоцића за Студентску награду Института за физику у Београду.

У Београду,
11. март 2026.

др Ненад Вукмировић
научни саветник
Институт за физику у Београду

Стручна биографија др Милана Јоцића

Милан Јоцић је рођен 1992. године у Нишу, где је завршио основну школу 2007. године. Исте године уписао је Гимназију „Светозар Марковић“ у Нишу, коју је завршио 2011. године.

Школске 2011/2012. године уписао је основне академске студије физике на Природно-математичком факултету Универзитета у Нишу, Департман за физику. Дипломирао је 2014. године са просечном оценом 9,13. Након тога је на истом факултету уписао мастер академске студије, модул Општа физика, које је завршио 2016. године. Мастер рад из предмета Квантна механика, под менторством доц. др Ненада Љ. Милојевића, одбранио је у октобру 2016. године. Рад је носио наслов „Трансфер електрона у судару протона са хелијумом (Electron Transfer in Proton-Helium Collision)“. Мастер студије завршио је са просечном оценом 9,85.

Школске 2016/2017. године уписао је докторске академске студије физике на Природно-математичком факултету Универзитета у Нишу. Од маја 2017. године запослен је на Институту за физику у Београду, најпре као истраживач приправник, а потом као истраживач сарадник. На истраживању везаном за докторску дисертацију ради од 2019. године. Објавио је три рада у врхунским међународним часописима М21 категорије (од којих два чине основу његове дисертације) и један у часопису М52 категорије.

Докторску дисертацију, урађену под менторством др Ненада Вукмировића, под називом „Електронска својства перовскитних нанокристала (Electronic Properties of Perovskite Nanocrystals)“ одбранио је 30. септембра 2025. године. Од 1. јануара 2024. године учествује у реализацији пројекта PolMoReMa, у оквиру програма ПРИЗМА Фонда за науку Републике Србије.

БИБЛИОГРАФИЈА др МИЛАНА ЈОЦИЋА

М21: Радови објављени у водећим међународним часописима:

- [1] M. Jocić and N. Vukmirović, *Ab-initio Calculations of Temperature Dependent Electronic Structures of Inorganic Halide Perovskite Materials*, Phys. Chem. Chem. Phys. **25**, 29017 (2023).
DOI: 10.1039/d3cp02054a
нумерички рад, 2 аутора, М=8
- [2] D. Danilović, A. Milosavljević, P. Sapkota, R. Dojcilović, D. Tošić, N. Vukmirović, M. Jocić, V. Đoković, S. Ptasinska, and D. K. Božanić: *Electronic Properties of Silver–Bismuth Iodide Rudorffite Nanoplatelets*, J. Phys. Chem. C **126**, 13739-13747 (2022).
DOI: 10.1021/acs.jpcc.2c03208
експериментални рад, 10 аутора, М=8, М_{ном}=5
- [3] M. Jocić and N. Vukmirović, *Ab Initio Construction of Symmetry-adapted k-p Hamiltonians for the Electronic Structure of Semiconductors*, Phys. Rev. B **102**, 085121 (2020).
DOI: 10.1103/PhysRevB.102.085121
нумерички рад, 2 аутора, М=8

М52: Радови објављени у часописима националног значаја:

- [1] M. Jocić and N. Vukmirović, *Temperature Dependence of the Electronic Band Gap of CsPbBr₃ Quantum Wells Obtained Using k-p Method*, Facta Univ.- Ser. Phys. Chem. Tech. **22**, 1 (2024)
DOI: 10.2298/FUPCT2401001J
нумерички рад, 2 аутора, М=1,5

М34: Саопштења са међународних скупова штампана у изводу:

- [1] M. Jocić and N. Vukmirović, *Temperature Dependence of Band Gaps of Inorganic Halide Perovskites* (2025)
Book of Abstracts, p. 13, ETSF 21st Young Researchers' Meeting 26-30 May, 2025 Trieste, Italy
<https://drive.google.com/file/d/1dCWbFwGk9BbZNhLa9a3OCag2fiLv9O3/view>
нумерички рад, 2 аутора, М=0,5
- [2] M. Jocić and N. Vukmirović, *Ab-initio Calculations of the Temperature-dependent Band Gap of Inorganic Halide Perovskites* (2022)
Book of Abstracts, p. 104, The 11th International Conference of the Balkan Physical Union (BPU11 Congress), 28 August - 1 September 2022, Belgrade, Serbia
<https://indico.bpu11.info/event/1/book-of-abstracts.pdf>
нумерички рад, 2 аутора, М=0,5
- [3] M. Jocić and N. Vukmirović, *Construction of Symmetry-adapted k-p Hamiltonians for Semiconductor Nanostructures* (2021)
Book of Abstracts, p. 50, 19th Young Researchers' Conference, December 1-3, 2021, Belgrade, Serbia
<https://www.mrs-serbia.org.rs/images/19YRC/19YRC-2021-Book%20of%20Abstracts.pdf>
нумерички рад, 2 аутора, М=0,5
- [4] M. Jocić and N. Vukmirović, *Construction of Symmetry-adapted k-p Hamiltonian from DFT Calculations* (2019)
Book of Abstracts, p. 43-44, ETSF 16th Young Researchers' Meeting 2-7 June, 2019 San Sebastian, Spain
https://899ab4c8-b803-4970-935f-304cd981c5b1.filesusr.com/ugd/d256d5_eb405b85037141fbaa3f0b549e1ee7cd.pdf
нумерички рад, 2 аутора, М=0,5

This author profile is generated by Scopus [↗](#)

Jocić, Milan

University of Belgrade, Belgrade, Serbia • Scopus ID: 57219314609 • [ORCID](#) [Connect to ORCID](#) [↗](#)[Show all information](#)

21

Citations by 21 documents

3

Documents

3

[h-index](#)[Set alert](#)[Edit profile](#)[More](#)[Documents \(3\)](#)[Impact](#)[Cited by \(21\)](#)[Preprints \(0\)](#)[Co-authors \(9\)](#)[Topics \(3\)](#)[Awarded grants \(0\)](#)

Beta

You can view, sort, and filter all of the documents in search results format.

[Export all](#) [Save all to list](#)Sort by [Cited by \(highest\)](#) [↕](#)

Article

Ab-initio calculations of temperature dependent electronic structures of inorganic halide perovskite materials

12

Citations

[Jocić, M., Vukmirović, N.](#)[Physical Chemistry Chemical Physics](#), 2023, 25(42), pp. 29017–29031[Show abstract](#) [Full text](#) [Related documents](#)

Article

Ab initio construction of symmetry-adapted k · p Hamiltonians for the electronic structure of semiconductors

6

Citations

[Jocić, M., Vukmirović, N.](#)[Physical Review B](#), 2020, 102(8), 085121[Show abstract](#) [Full text](#) [Related documents](#)Article • *Open access*

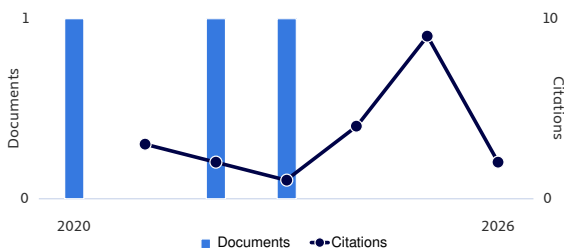
Electronic Properties of Silver-Bismuth Iodide Rudorffite Nanoplatelets

3

Citations

[Danilović, D., Milosavljević, A.R., Sapkota, P., ... Ptasinaka, S., Božanić, D.K.](#)[Journal of Physical Chemistry C](#), 2022, 126(32), pp. 13739–13747[Show abstract](#) [Full text](#) [Related documents](#)Display [10 results](#) [↕](#)[View all references](#)

Document & citation trends

[Citation overview](#)[Analyze author output](#)

Author Position for 2015 - 2024

First author

67%

2

9

0.8



Citation Report

Q jovic m* (Author) and phys (Address)

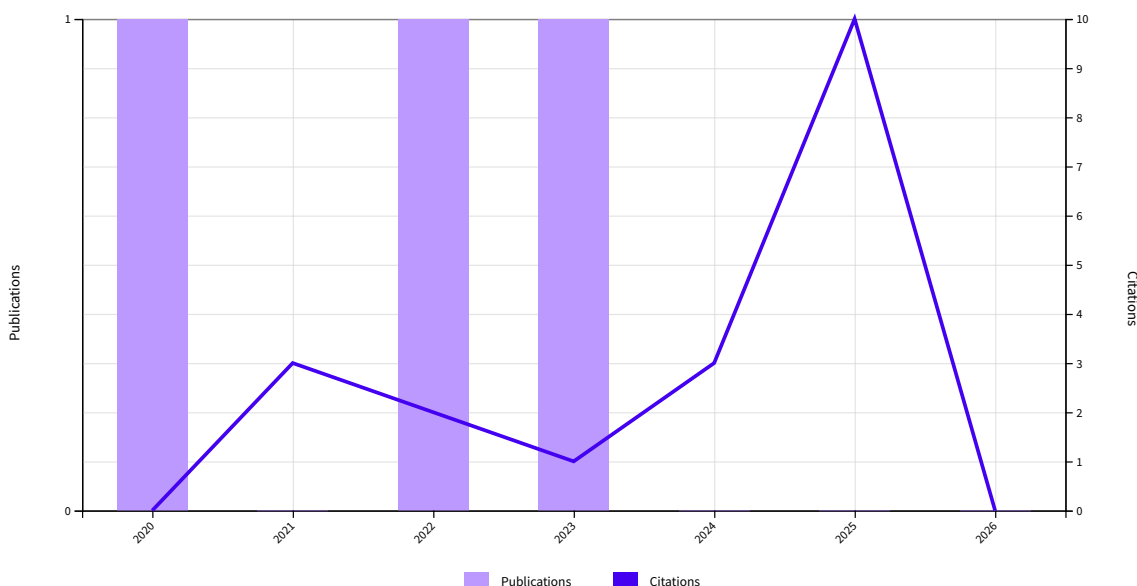
Analyze Results Create Alert

Export Full Report

Publications 3 Total From 1985 to 2026	Citing Articles 19 Analyze Total 17 Analyze Without self-citations	Times Cited 19 Total 17 Without self-citations 6.33 Average per item	H-Index
---	---	--	----------------

Times Cited and Publications Over Time

DOWNLOAD



3 Publications	Citations							Total
	Citations					Average per year	Total	
	2022	2023	2024	2025	2026			
Total	2	1	3	10	0	3.17	19	
1 Ab-initio calculations of temperature dependent electronic structures of inorganic halide perovskite materials Jovic, M and Vukmirovic, N Nov 1 2023 PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 25(42), pp.29017-29031	0	0	2	8	0	2.5	10	
2 Ab initio construction of symmetry-adapted k . p Hamiltonians for the electronic structure of semiconductors Jovic, M and Vukmirovic, N Aug 11 2020 PHYSICAL REVIEW B 102(8)	2	1	0	0	0	0.86	6	
3 Electronic Properties of Silver-Bismuth Iodide Rudorffite Nanoplatelets Danilovic, D; Milosavljevic, AR; (...); Bozanic, DK Aug 18 2022 JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 126(32), pp.13739-13747	0	0	1	2	0	0.6	3	