

## НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ

**Предмет:** Реферат о урађеној докторској дисертацији кандидата Марка Ћосића

Одлуком бр. 3339/08-3 од 23. 06. 2014 године, именовани смо за чланове Комисије за преглед, оцену и одбрану докторске дисертације кандидата **Марка Ћосића** дипломираног инжењера електротехнике под насловом

### **Квантне дуге при каналисању позитрона у угљеничним наноцевима**

После прегледа достављене Дисертације и других пратећих материјала и разговора са кандидатом, Комисија је сачинила следећи

## РЕФЕРАТ

### 1. УВОД

#### 1.1. Хронологија одобравања и израде дисертације

Кандидат је пријавио тему за израду докторске дисертације 1. 7. 2013 године. Комисија за студије трећег степена разматрала је предлог Комисије за оцену услова и прихваћање теме докторске дисертације на састанку одржаном 3. 7. 2013. године. На предлог Комисије за студије трећег степена, Изборно и Наставно-Научно веће Електротехничког факултета у Београду је на 764. седници, одржаној 11. 07. 2013. године, именовало комисију за оцену услова и прихватања теме докторске дисертације кандидата **Марка Ћосића**, дипломираног инжењера електротехнике, под називом **Квантне дуге при каналисању позитрона у угљеничним наноцевима**. Предложени састав комисије је: ментор др Јелена Радовановић, ванредни професор (Универзитет у Београду - Електротехнички факултет), др Срђан Петровић, научни саветник (Универзитет у Београду - Институт за нуклеарне науке „Винча“), др Небојша Нешковић, научни саветник (Универзитет у Београду - Институт за нуклеарне науке „Винча“), др Јован Елазар, ванредни професор (Универзитет у Београду - Електротехнички факултет), др Витомир Милановић, професор емеритус (Универзитет у Београду - Електротехнички факултет) и др Јован Цветић, редовни професор (Универзитет у Београду - Електротехнички факултет). Извештај комисије је усвојен на 765. седници Изборног и Наставно - Научног већа Електротехничког факултета одржаној 03. 09. 2013.

године. Веће научних области техничких наука Универзитета у Београду, на седници одржаној 16. 9. 2013. године одлуком под бројем 61206-4010/2-13 даје сагласност на предлог теме докторске дисертације.

Докторску дисертацију кандидат предаје 21. 05. 2014. године. На седници Комисије за трећи степен студија, одржаној 27. 05. 2014. године, констатовано је да је кандидат **Марко Ћосић**, дипломирани инжењер електротехнике, предао урађену дисертацију. Увидом у дисертацију и у пратећа докумената, а у складу са Правилником о докторским студијама Електротехничког факултета, Комисија за трећи степен студија потврдила је испуњеност потребних услова за подношење предлога Изборном и Наставно-научном већу Електротехничког факултета за формирање Комисије за преглед и оцену дисертације. Предложени састав комисије је: ментор др Јелена Радовановић, ванредни професор (Универзитет у Београду - Електротехнички факултет), др Срђан Петровић, научни саветник (Универзитет у Београду - Институт за нуклеарне науке „Винча“), др Небојша Нешковић, научни саветник (Универзитет у Београду - Институт за нуклеарне науке „Винча“), др Витомир Милановић професор емеритус (Универзитет у Београду - Електротехнички факултет) и др Пеђа Михаиловић, ванредни професор (Универзитет у Београду - Електротехнички факултет). На 775. седници Изборног и Наставно-научног већа Електротехничког факултета, одржаној 17. 06. 2014. године, прихваћен је предлог Комисије за трећи степен студија.

Докторске студије кандидат је уписао 12. марта 2007., школске 2007/2008 године. Због цивилног служења војног рока кандидату је школске 2009/2010 године мировао статус студента докторских студија. На основу одлуке Наставно-научног већа бр. 2944/2 од 11.10.2007. године, Студијски програм је започео у пролећном семестру школске 2007/2008, па се рок за завршетак докторских академских студија рачуна од почетка тог семестра, сагласно Статуту Универзитета у Београду и Статуту Електротехничког факултета.

## 1.2. Научна област дисертације

Научна област дисертације је електротехника и рачунарство, а у ужем смислу предмет дисертације је наноелектроника и фотоника. Ментор дисертације је др Јелена Радовановић, ванредни професор Електротехничког факултета Универзитета у Београду.

## 1.3. Биографски подаци о кандидату

Кандидат Марко Ћосић рођен је 13. јуна 1982. године у Сенти, Србија. Дипломирао је 3. октобра 2006. године на Електротехничком факултету Универзитета у Београду, на одсеку за Физичку електронику, смер Оптикелектроника, са просечном оценом у току студија 8,72. Уписао је докторске студије школске 2007/2008 године, на Електротехничком факултету Универзитета у Београду, на одсеку за Физичку електронику, смер Наноелектроника и фотоника. Положио је стручни испит из области Телекомуникационих мрежа и система и члан је Инжењерске коморе Србије од 1. априла 2010. године. Марко Ћосић је запослен у Лабораторији за физику Института за нуклеарне науке „Винча“. У звање истраживача сарадника изабран је 3. марта 2011. године. Сарадник је на истраживачком пројекту ИИИ4506: „Физика и хемија са јонским сноповима“. Аутор је 4 рада у врхунским међународним часописима, 2 рада у истакнутим међународним часописима као и по једног саопштења са међународног и домаћег скупа.

## **2. ОПИС ДИСЕРТАЦИЈЕ**

### 2.1. Садржај дисертације

Докторска теза се бави примарно квантним видовима ефекта дуге који се јавља при каналисању честица кроз угљеничне наноцеви. У ту сврху детаљно је разматрано каналисање позитрона кинетичке енергије 1 MeV кроз хиралне наноцеви типа (11, 9). Дисертација је написана на 150 стране куцаног ћириличног текста и садржи 33 слика и 88 библиографских референци. Садржи насловну страну на српском и енглеском језику, захвалницу, сажетак дисертације на српском и енглеском језику, листу коришћених симбола, садржај, осам глава, преглед литературе као и четири главе прилога. Наслови глава дисертације су: 1. Увод, 2. Каналисање класичних честица, 3. Угљеничне наноцеви, 4. Каналисање квантних честица, 5. Нумеричко решавање Шредингерове једначине, 6. Квантне дуге у наноцевима, 7. Карактеризација хиралних наноцеви путем каналисања 8 Закључци, а наслови прилога су: А. Прилог за каналисање класичних честица, Б. Термалне вибрације наноцеви, В. Квантно каналисање и Г. Прилог за нумеричко решавање Шредингерове једначине.

## 2.2. Кратак приказ појединачних поглавља

У првој глави уведен је појам дугиног расејања и објашњен је његов значај у области каналисања позитивно наелектрисаних честица кроз кристале и наноцеви. Дат је преглед досадашњих најзначајнијих теоријских студија са освртом на релевантне екперименталне резултате. У овој глави детаљно је објашњена потреба да се ефекат каналисања размотри и квантномеханички.

Друга глава садржи кратак преглед теорије класичног каналисања позитивно наелектрисаних честица размотреног на примеру кристала силицијума. Осни и равански канали кристала су дефинисани. Потенцијал интеракције јон – кристал је изведен уз коришћење континуалне апроксимације. Критичан угао за каналисање је дефинисан. Показана је зависност диференцијалног пресека за расејање од ударног параметра и његова веза са ефектом дуге. Представљен је модел кристалне дуге, као и његово проширење, теорија кристалне дуге.

У трећој глави детаљно је размотрена геометријска структура наноцеви. Показано је како се на основу структуре наноцеви добија потенцијал интеракције јон - наноцев. Изведен је развој потенцијала интеракције у Фуријеов ред по азимуталној координати, на основу кога је показано да се потенцијал хиралних наноцеви може сматрати приближно осно симетричним. Објашњено је како се урачунавају ефекти термалних вибрација атома угљеника. На крају, представљени су главни резултати теорије дуга у случају наноцеви.

Четврта глава се бави проблемом квантног каналисања. Показано је да се проблем кретања наелектрисане честице кроз чврсто тело у случају каналисања своди на једночестични проблем кретања наелектрисане честице у трансверзалној равни. Квантне поправке класичном потенцијалу канала су изведене и доказано је да су занемариве. На крају је дат квантни опис макроскопског снопа и процеса каналисања на примеру каналисања позитрона кроз наноцеви.

У глави пет размотрени су рачунски методи за дугу временску пропацију таласне функције: у бесконачном хармонијском, коначном хармонијском потенцијалу као и у потенцијалу хиралне наноцеви. Развијен је тачан и ефикасан нумерички метод интеграције Шредингерове једначине који је погодан за примену у области квантног каналисања.

У глави шест приказани су резултати детаљне студије трансмисије позитрона кинетичке енергије 1 и 10 MeV кроз веома кратке једнозидне угљеничне наноцеви типа (11,9). Класични и квантни ефекти су размотрени док је студија примарно усмерена на истраживање ефекта дуге. Размотрен је адекватан начин репрезентације појединачне квантне честице у оквиру формализма матрице густине. Разматран је утицај дивергенције макроскопског снопа на просторне и угаоне расподеле трансмитованих позитрона.

Глава седам садржи резултате детаљног проучавања квантног каналисања позитрона кроз хиралне једнозидне угљеничне наноцеви. Показано је да се ефекат квантног дугиног

каналисања може искористити за карактеризацију хиралних наноцеви. Ради поређења, разматране су одговарајуће класичне угловне расподеле каналисаних позитрона.

У глави осам дати су закључци дисертације, њени главни доприноси и значај.

Прилог А садржи детаљно извођење Графових адиционих формула за Беселове функције прве и друге врсте, извођење импулсне апроксимације као и критичног угла за каналисање на основу услова максималног приближења.

Прилог Б садржи извођење потенцијала интеракције јон - наноцев са урачунатим ефектима термалних вибрација за произвољну наноцев. У случају хиралних наноцеви изведен је и једноставни аналитички приближни израз.

У прилогу В показано је како се у случају каналисања релативистичка Диракова једначина, која описује кретање каналисане честице, своди на временски зависну Шредингерову једначину у трансверзалној равни. Показано је да се квантне поправке класичном електростатичком потенцијалу интеракције занемариве и изведен је израз за ефективни Хамилтонијан за проблеме каналисања. Додатно, изведена је веза између угаоних расподела каналисаних позитрона на излазу из наноцеви и експериментално мерљивих угаоних расподела у далеком пољу.

Прилог Г садржи извођење снажне стабилности Чебишевог метода глобалне пропагације као и Кранк - Николсоновог метода пропагације. Изведено је аналитичко решење еволуције Гаусовог таласног пакета у хармонијском потенцијалу.

### 3. ОЦЕНА ДИСЕРТАЦИЈЕ

#### 3.1. Савременост и оригиналност

У дисертацији су разматрани квантни ефекти који се јављају при каналисању позитрона кроз хиралне једнозидне угљеничне наноцеви. Појединачни таласни пакети су представљени таласним пакетима док је сноп позитрона представљен мешаним стањем. Угаоне расподеле трансмитованих позитрона добијене су методом Монте - Карло симулације на основу експлицитних решења Шредингерове једначине.

Овакав приступ квантном каналисању је оригиналан. Уобичајено је да се цео позитронски сноп представља једним чистим квантним стањем, које је представљено раванским таласом ван кристала и одговарајућим Блоховим стањима унутар кристала. У приступу примењеном у овој дисертацији, дивергенција позитронског снопа је природно укључена кроз ширину таласног пакета, док је тако нешто немогуће у уобичајеном приступу квантном каналисању.

Идеја да се позитрони представљају таласним пакетима и да се процес каналисања посматра преко кретања таласних пакета омогућила је да се оствари блиска аналогија са класичним случајем. Анализа доприноса појединачних таласних пакета уз поређење са резултатима класичне теорије дуге омогућио је да се уочи квантни ефекат дуге.

Шредингерова једначина решавана је у временском домену, путем Чебишевог метода глобалне пропагације, који је специјално модификован за примену у области каналисања. Експлицитно одређивање граница спектра Хамилтонијана довело је до повећања тачности прорачуна у односу на уобичајено коришћене приближне вредности. Овакав приступ скалирању спектра Хамилтонијана је нов и не постоји у литератури која је посвећена нумеричком решавању Шредингерове једначине. Тачност прорачуна утврђена је поређењем стандардних девијација нумеричког и аналитичког решења. На овај начин гарантован је исправан облик таласне функције, што се не може постићи минимизацијом норме разлике приближног и тачног решења.

У дисертацији је предложена примена квантног ефекта дуге за карактеризацију кратких хиралних угљеничних наноцеви. Ова идеја представља разраду раније предложеног метода карактеризације наноцеви помоћу класичне теорије дуга, за који је показано да се не може успешно применити у случају хиралних наноцеви. Показано је да су квантне дуге знатно осетљивије на промену трансверзалне структуре наноцеви у односу на класичне.

### 3.2. Осврт на референтну и коришћену литературу

Литература коришћена у изради дисертације је пажљиво одабрана. Она обухвата како најновије радове везане за област каналисања, тако и класичне опште познате референце, које на адекватан начин покривају област дисертације.

### 3.3. Опис и адекватност примењених научних метода

Лонгитудиналним усредњавањем Молијерове апроксимације Томас- Фермијевог потенцијала интеракције позитрон - угљеник добијен је потенцијал једног атомског низа атома угљеника. Урачунавањем доприноса свих атомских низова добијен је потенцијал интеракције позитрон - наноцев. У случају хиралних наноцеви потенцијал интеракције је добијен додатним усредњавањем по азимуталној координати. Утицај термалних вибрација укључен је усредњавањем добијеног потенцијала по термално индукованим померајима атома угљеника, при чему је претпостављено да су термалне вибрације мале и некорелисане. Претпостављено је да су наноцеви кратке тако да се енергетски губитак као и интеракција са електронским облаком може занемарити. Овакав приступ је уобичајен у области каналисања и има значајну експерименталну потврду.

Шредингерова једначина је решавана путем Чебишеовог метода глобалне пропагације са експлицитним скалирањем спектра Хамилтоновог оператора. Класичне трајекторије каналисаних позитрона добијене су решавањем Њутнових једначина кретања методом Рунге - Кута четвртог реда. Коришћени методи су добро познати и омогућавају ефикасно решавање квантних и класичних једначина кретања.

Класичне и квантне расподеле каналисаних позитрона у угаоном и координатном простору добијене су путем Монте - Карло симулације. Оваквим приступом избегнута је могућа појава систематске грешке у избору ударних параметара. Класичне линије дуге добијене су нумеричким проналажењем нула Јакобијана пресликавања равни ударног параметра у раван угла расејања. У квантном приступу позитронски сноп је третиран као ансамбл неинтереагујућих таласних пакета описаних формализмом матрице густине. Просторне и угаоне расподеле трансмитованих позитрона добијене су на основу координатне и угаоне репрезентације матрице густине. Угаоне расподеле су нумерички добијене на ефикасан начин коришћењем „ФФТ“ алгорита.

### 3.4. Применљивост остварених резултата

Развијени модел је довољно општи да се може веома једноставно прилагодити за проучавање квантних ефеката дуге у кристалима. Нумерички модел такође допушта једноставно укључење ефеката енергетског губитка каналисане честице и њене интеракција са електронским облаком кристала преко додатног чисто имагинарног „оптичког“ потенцијала.

Развијени физички модел је добра полазна основа за проучавање разних квантних поправки многих ефеката као што су ефекат суперфокусирања, зрачења услед каналисања итд. Ефекат дуге би се додатно могао искористити за одређивање потенцијала интеракције позитрон - наноцев.

Квантни ефекат дуге могао би такође бити коришћен за директно експериментално одређивање хиралног вектора наноцеви. Оваква метода карактеризације наноцеви могла би да омогући да се добију информације о структури наноцеви у току њиховог формирања.

### 3.5. Оцена достигнутих способности кандидата за самостални научни рад

На основу прегледане дисертације Комисија процењује да је кандидат Марко Ћосић, дипломирани инжењер електротехнике, у потпуности способан за самостални научни рад. Ово је показано и чињеницом да је из области дисертације као први аутор објавио два рада и као коаутор један рад у врхунским међународним часописима (категорије M21). Поред тога, кандидат је објавио и један рад категорије M21 и два рада категорије M22. Кандидат је приликом израде дисертације показао систематичност у раду, истрајност у решавању насталих проблема и иницијативу за овладавањем новим научним сазнањима и методама.

## **4. ОСТВАРЕНИ НАУЧНИ ДОПРИНОС**

### 4.1. Приказ остварених научних доприноса

Основни научни доприноси који су остварени у оквиру докторске дисертације су следећи:

1. Показано је постојање ефекта дуге при каналисању позитрона у угљеничним наноцевима.
2. Предложена је класификација квантних дуга полазећи од одговарајућих класичних.
3. Разматран је процес преласка између квантног и класичног описа процеса каналисања позитрона који се јавља са променом његове енергије и дивергенције позитронског снопа.
4. Показано је постојање разлике између трансмитованих угаоних расподела када је позитронски снап представљен раванским таласом и колективом неинтереагујућих таласних пакета.
5. Предложена је могућност карактеризације трансверзалне структуре хиралних угљеничних наноцеви коришћењем угаоних расподела каналисаних позитрона односно одговарајућих квантних дуга.
6. Чебишевов метод глобалне пропагације је модификован тако да се може искористити за праћење дуге пропагације таласних пакета.

### 4.2. Критичка анализа резултата истраживања

Представљени резултати у дисертацији доприносе дубљем разумевању таласно - честичне природе квантних честица пошто је детаљно показан прелаз од квантног ка класичном понашању ансамбла честица. Додатно, физичка слика добијена на основу кретања појединачних таласних пакета омогућава анализу њиховог појединачног доприноса на добијене угаоне расподеле. Са друге стране, у стандардном приступу квантном каналисању позитронски снап је представљен раванским таласом а решења Шредингерове једначине добијају се у импусном простору методом динамичке дифракције. Овакавим приступом немогуће је идентификовати доприносе појединачних позитрона.

Изложени резултати у дисертацији не укључују ефекте интеракције позитрона са електронским гасом и његовог енергијског губитка, зато што су разматране наноцеви биле кратке. Да би се на адекватан начин проучавао ефекат суперфокусирања или карактеризација наноцеви, важење коришћеног модела је потребно проширити и на наноцеви веће дужине,

дакле, укључити ефекте интеракције позитрона са електронским гасом и његовог енергијског губитка.

#### 4.3. Верификација научних доприноса

Кандидат Марко Ћосић је до сада објавио четири рада категорије M21 и два рада категорије M22. Проблематици докторске дисертације припадају следећи радови:

##### Категорија M21

1. S. Petrović **M. Ćosić** and N. Nešković, Quantum rainbow channeling of positrons in very short carbon nanotubes, *Physical Review A*, 88, 012902 p. 012902-1, 2013, (**IF=3.042**) (ISSN: 1094-1622),
2. **M. Ćosić**, S. Petrović, N. Nešković, Quantum rainbow characterization of short chiral carbon nanotubes, *Nucl Instrum Meth B*, 323, p 30–35, 2014, (**IF=1.266**) (ISSN: 0168-583X),
3. **M. Ćosić**, S. Petrović, N. Nešković, Computational method for the long time propagation of quantum channeled particles in crystals and carbon nanotubes, *Nucl Instrum Meth B*, 330, p 33–41, 2014, (**IF=1.266**) (ISSN: 0168-583X).

Остали радови кандидата:

##### Категорија M21

1. S. Petrović, N. Nešković, V. Berec, and **M. Ćosić**, Superfocusing of channeled protons and subatomic measurement resolution, *Physical Review A* 85, 032901, 032901-1, 2012, (**IF=3.042**) (ISSN: 1094-1622),

##### Категорија M22

1. **M. Ćosić**, Group-theoretical approach to Bloch electron in magnetic field problem, *Journal of Mathematical Physics* 51, 062104, p. 062104,-1, 2010, (**IF=1.284**) (ISSN: 1089-7658),
2. S. Bellucci, Yu.A. Chesnokov, P.N. Chirkov, **M. Ćosić**, G. Giannini, V.A. Maishev, S. Petrović, I.A. Yazynin, Deflection of 100 MeV positron beam by repeated reflections in thin crystals, *Pis'ma v ZhETF*, vol. 98, 11, p. 739, (2013). (**IF=1.345**) (ISSN: 1090-6487).

## 5. ЗАКЉУЧАК И ПРЕДЛОГ

Дисертација кандидата **Марка Ћосића** под називом **Квантне дуге при каналисању позитрона у угљеничним наноцевима** представља оригиналан научни допринос у области квантног каналисања. Показано је постојање квантних дуга, предложена је могућа практична примена квантног ефекта дуге и унапређене су рачунске методе решавања временски зависне Шредингерове једначине. Комисија констатује да је Марко Ћосић, дипломирани инжењер електротехнике, испунио све услове предвиђене Законом о високом образовању, Статутом и Правилником о докторским студијама Електротехничког факултета Универзитета у Београду. У складу са тим Комисија предлаже Изборном и Наставно-научном већу Електротехничког факултета да се докторска дисертација под називом **Квантне дуге при каналисању позитрона у угљеничним наноцевима** кандидата **Марка Ћосића** прихвати, изложи на увид јавности и упути Већу научних области техничких наука Универзитета у Београду на коначно усвајање и давање одобрења кандидату да приступи усменој одбрани.

Београд

02. 07. 2014.

### ЧЛАНОВИ КОМИСИЈЕ



др Јелена Радовановић, ванредни професор

Универзитет у Београду – Електротехнички факултет



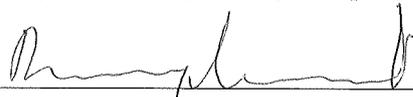
др Срђан Петровић, научни саветник

Универзитет у Београду – Институт за нуклеарне науке „Винча“



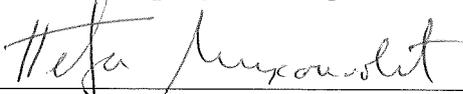
др Небојша Нешковић, научни саветник

Универзитет у Београду – Институт за нуклеарне науке „Винча“



др Витомир Милановић, професор емеритус

Универзитет у Београду – Електротехнички факултет



др Пеђа Михаиловић, ванредни професор

Универзитет у Београду – Електротехнички факултет