

## НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ

**Предмет:** Реферат о урађеној докторској дисертацији кандидата **Милана Жежеља**

Одлуком бр. 5043/09-3 од 24. новембра 2016. године, именовани смо за чланове Комисије за преглед, оцену и одбрану докторске дисертације кандидата **Милана Жежеља** под насловом

### **Modeling and optimization of transport processes in modern nanoelectronic devices**

### **Моделовање и оптимизација транспортних процеса у савременим наноелектронским уређајима**

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 Милан Жежељ је 25. децембра 2009. уписао докторске академске студије Електротехнике и рачунарства, модул Наноелектроника и фотоника, на Електротехничком факултету Универзитета у Београду. Испите на докторским студијама је положио са просечном оценом 10.

По истеку законског рока за завршетак докторских академских студија, на захтев студента, одобрено је продужење рока за завршетак ових студија за још два семестра, сагласно члану 92. став 4 Статута Универзитета у Београду, као и додатно продужење за годину дана на основу Одлуке бр. 24-06/22-2009/5043 од 8. новембра 2016. године.

Кандидат Милан Жежељ је 23. јуна 2016. године пријавио тему за израду докторске дисертације под радним насловом „Modeling and optimization of transport processes in modern nanoelectronic devices“ („Моделовање и оптимизација транспортних процеса у савременим наноелектронским уређајима“).

Комисија за студије трећег степена је 28. јуна 2016. године разматрала предлог теме за израду докторске дисертације и предлог Комисије о оцени подобности теме и кандидата упутила Наставно-научном већу на усвајање.

Наставно-научно веће Електротехничког факултета је на седници бр. 801 одржаној 05. јула 2016. године (одлука бр. 5043/09-1 од 11. јула 2016.) именовало Комисију за оцену услова и прихватања теме докторске дисертације у саставу:

- др Витомир Милановић, професор емеритус, Универзитет у Београду – Електротехнички факултет
- др Ненад Вукмировић, виши научни сарадник, Универзитет у Београду – Институт за физику у Београду и
- др Бранко Малешевић, ванредни професор, Универзитет у Београду – Електротехнички факултет.

За ментора је предложена:

- др Јелена Радовановић, редовни професор, Универзитет у Београду – Електротехнички факултет

Јавна усмена одбрана предложене теме докторске дисертације обављена је 12. јула 2016. године на Електротехничком факултету, пред именованом Комисијом. Комисија је закључила да је кандидат на јавној усменој одбрани предложене теме докторске дисертације добио оцену “задовољио”.

Комисија за студије трећег степена, на седници одржаној 6. септембра 2016. године, је разматрала и једногласно прихватила извештај Комисије за оцену услова и прихватања теме докторске дисертације кандидата Милана Жежеља. Наставно-научно веће Електротехничког факултета у Београду усвојило је Извештај Комисије за оцену услова и прихватања теме докторске дисертације кандидата Милана Жежеља на седници одржаној 27. септембра 2016. године (одлука бр. 5043/09-2).

На седници одржаној 31. октобра 2016. године, Веће научних области техничких наука Универзитета у Београду, одлука бр. 61206-5280/2-16, је дало сагласност на предлог теме докторске дисертације Милана Жежеља под насловом „Modeling and optimization of transport processes in modern nanoelectronic devices“ („Моделовање и оптимизација транспортних процеса у савременим наноелектронским уређајима“).

Кандидат је 3. новембра 2016. године предао на преглед и оцену докторску дисертацију под насловом „Modeling and optimization of transport processes in modern nanoelectronic devices“ („Моделовање и оптимизација транспортних процеса у савременим наноелектронским уређајима“).

Комисија за студије трећег степена потврдила је 8. новембра 2016. године испуњеност свих потребних услова и Наставно-научном већу Електротехничког факултета поднела предлог за именовање Комисије за преглед и оцену докторске дисертације. На седници бр. 806 од 15. новембра 2016. године, Наставно-научно веће Електротехничког факултета именovalo је Комисију за преглед и оцену докторске дисертације (бр. одлуке 5043/09-3 од 24. новембра 2016. године) у саставу:

- др Јелена Радовановић, редовни професор, Универзитет у Београду – Електротехнички факултет
- др Витомир Милановић, професор емеритус, Универзитет у Београду – Електротехнички факултет
- др Игор Станковић, виши научни сарадник, Универзитет у Београду – Институт за физику у Београду
- др Јован Радуновић, редовни професор у пензији, Универзитет у Београду – Електротехнички факултет

- др Бранко Малешевић, ванредни професор, Универзитет у Београду – Електротехнички факултет

## 1.2. Научна област дисертације

Докторска дисертација кандидата Милана Жежеља под насловом „Modeling and optimization of transport processes in modern nanoelectronic devices“ („Моделовање и оптимизација транспортних процеса у савременим наноелектронским уређајима“) припада области физичке електронике за коју је матичан Електротехнички факултет Универзитета у Београду.

Именовани ментор докторске дисертације др Јелена Радовановић, редовни професор Електротехничког факултета Универзитета у Београду, активно се бави истраживањем из наведене научне области. До сада је објавила 85 радова у међународним часописима са SCI листе и више десетина радова у зборницима радова међународних конференција.

## 1.3. Биографски подаци о кандидату

Милан Жежељ је рођен 24. марта 1985. године у Земуну. Завршио је Математичку гимназију у Београду 2004. године са освојеном бронзаном медаљом на 34-тој Међународној олимпијади из физике. Исте године уписује Електротехнички факултет у Београду. Дипломирао је на Одсеку за електронику 2008. године са просеком 9,96. Мастер студије је завршио на истом факултету и одсеку 2009. године са просеком 10,00. Исте године је уписао Докторске студије на модулу Наноелектроника и фотоника.

Кандидат је почетком новембра 2009. године започео истраживачки рад на Институту за физику у Лабораторији за Примену рачунара у науци. Од 1. фебруара до 31. децембра 2010. године је као стипендиста-докторант Министарства за науку и технолошки развој Републике Србије ангажован на пројекту основних истраживања: „Моделовање и нумеричке симулације сложених физичких система“ (број: ОИ 141035). Од 1. јануара 2011. године је запослен на Институту за физику и ангажован на два пројекта Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије: „Моделовање и нумеричке симулације сложених вишечестичних система“ (број: ОИ 171017) и „Наноструктурни мултифункционални материјали и нанокомпозити“ (број: ИИИ 45018). У звање истраживач сарадник изабран је 28. новембра 2011. године. Од 1. децембра 2009. године до 1. децембра 2012. године кандидат је био ангажован на SCOPES пројекту Швајцарске националне научне фондације: „Примене нанокристалног порозног анатас  $\text{TiO}_2$  у заштити животне средине: процес синтезе и проучавање транспортних карактеристика“ (број: IZ73Z0-128169). У школској 2011/2012. години кандидат је био члан Државне комисије за такмичења ученика средњих школа из физике као коаутор задатака за 3. разред и Српску физичку олимпијаду. Учествовао је на више међународних конференција. Објавио је један рад у међународном часопису изузетних вредности (категирија M21a), четири рада у врхунским међународним часописима (категирија M21), један рад у тематском зборнику водећег међународног значаја (категирија M13) и шест саопштења са међународних скупова штампана у изводу (категирија M34).

## **2. ОПИС ДИСЕРТАЦИЈЕ**

### 2.1. Садржај дисертације

Дисертација под насловом „Modeling and optimization of transport processes in modern nanoelectronic devices“ („Моделовање и оптимизација транспортних процеса у савременим наноелектронским уређајима“) написана је на 115 страна куцаног текста на енглеском језику,

са 44 слике, 1-ом табелом и 109 нумерисаних једначина. Дисертација је по облику и садржају формирана на основу Упутства за обликовање докторске дисертације и Упутства за формирање репозиторијума докторских дисертација Универзитета у Београду. Дисертација садржи насловну страну на енглеском и српском језику, захвалнице, апстракт рада на енглеском и српском језику, садржај, 6 поглавља, 4 прилога, списак коришћене литературе који обухвата 137 библиографских референци, страну са списком публикација кандидата, страну са кратком биографијом кандидата, као и попуњене и потписане одговарајуће изјаве (Изјаву о ауторству, Изјаву о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада и Изјаву о коришћењу). Поглавља дисертације су:

1. Introduction
2. Finite-size scaling in asymmetric systems of percolating sticks
3. From percolating to dense random nanowire networks: electrical conductivity and optical transparency investigation
4. Random networks of carbon nanotubes optimized for transistor mass-production
5. Modeling and optimization of quantum cascade laser characteristics
6. Summary

## 2.2. Кратак приказ појединачних поглавља

У првом, уводном поглављу, је најпре дат кратак преглед основних транспортних процеса у наноелектронским уређајима са освртом на њихов значаја и примену. Након тога, дат је преглед одговарајућих статистичких метода и модела неопходних за разумевање транспортних процеса у системима са комплексном и неуређеном морфологијом, као што су алгоритми за детектовање перколације, методе конјугованих градијената и алгоритми за симулирано одгревање. Затим је дат опис савремених наноелектронских уређаја чија транспортна својства се моделују и оптимизују коришћењем ових метода и алгоритама, а које чине: прозирне електроде са неуређеним мрежама наножица, танкослојни транзистори са неуређеним мрежама угљеничних нанотуба и квантни каскадни ласери. Након тога су укратко описани најважнији транспортни процеси у наведеним уређајима и представљени најважнији приступи њиховом моделовању и оптимизацији.

У другом поглављу разматран је генералан случај перколације у коначном систему проводника (који би могао бити неуређена мрежа наножица или угљеничних нанотуба). Као полазна тачка узет је систем насумично распоређених штапића занемарљиве дебљине, узимајући у обзир да је дужина наножица и угљеничних нанотуба много већа од њиховог пречника. Након тога је развијен ефикасан нумерички алгоритам за детектовање перколације насумично распоређених штапића. Користећи овај алгоритам испитан је утицај коначне величине система на перколациона својства насумично распоређених штапића (наножица и нанотуба) у правоугаоним системима са променљивим односом њихове дужине и ширине. Изведене су генерализовани изрази за скалирање момената функције густине расподеле вероватноће перколације са величином система. Експоненти, као и сам облик израза скалирања, су универзални (важе за било који перколирајући систем). То значи да су непарност првог момента (тј. средња вредност густине перколације) и парност другог момента (тј. стандардне девијације) универзалне. Једино што је везано за систем у изведеним функцијама за моменте су коефицијенти. Одређене су вредности коефицијената за правоугаоне системе насумично распоређених штапића. Показано је да је непарност првог момента узрок брже конвергенције са повећањем величине система, ка перколационом прагу бесконачног система, средње густине перколације симетричног система у односу на асиметрични. Коначно, потврђено је да се вероватноћа перколације може описати Гаусовом расподелом са параметрима добијеним користећи предложене функције скалирања за прва два момента расподеле вероватноће перколације (средње вредности густине перколације и стандардне девијације).

У трећем поглављу је развијен ефикасан нумерички алгоритам на бази конјугованих градијената за израчунавање електричне проводности неуређене мреже правих проводника (што је типичан случај у електродама од наножица). Користећи овај алгоритам испитана је зависност електричне проводности неуређене мреже наножица од њихове концентрације, почев од перколационог прага до концентрације десет пута веће од перколационог прага. Показано је да универзални степени закон коришћен у литератури описује проводност система само за концентрације које су у непосредној близини перколационог прага. Предложен је модел електричне проводности неуређене мреже наножица који експлицитно зависи од концентрације наножица и односа проводности контакта и наножице. Показано је да се предложени модел може применити на неуређене мреже наножица у широком опсегу њихових концентрација, почев од перколационог прага до веома густе мреже. Дата је и аналитичка верзија модела за коначне симетричне системе мрежа правих проводника. Коришћењем предложеног модела описан је однос између оптичке транспарентности и електричне проводности неуређене мреже наножица.

У четвртном поглављу су нумерички проучавани ефекти геометријских и структурних параметара танкослојних транзистора са неуређеним мрежама угљеничних нанотуба на њихове транспортне и електричне карактеристике. Испитан је ефекат промене дужине нанотуба на транспортна својства мреже, почев од веома кратких нанотуба код којих је доминантан балистички транспорт електрона, до веома дугачких код којих доминира дифузни транспорт. Предложен је метод за одређивање оптималног опсега концентрације и дужине нанотуба, ширине и дужине канала у оквиру кога се неуређена мрежа угљеничних нанотуба понаша као транзистор са униформним транспортним и прекидачким карактеристикама. Предложени резултати омогућавају ефикасну масовну производњу транзистора (са до 1% отпада) са прихватљивим транспортним и прекидачким својствима користећи минималан број производних корака без примене било каквих додатних поступака селекције или уређења нанотуба током и/или након процеса синтезе.

У петом поглављу су представљени модели расејања електрона на лонгитудиналним оптичким фононима и површинским неравнинама између слојева активне области у присуству, као и у одсуству, спољашњег магнетног поља нормалног на слојеве активне области. Користећи развијене моделе проучавани су ефекти расејања електрона на површинским неравнинама анализирајући одговарајућа времена релаксације електрона и оптичко појачање ласера при различитим температурама и интензитетима магнетног поља. На основу тога је показано да расејање електрона на површинским неравнинама између слојева активне области значајно утиче на рад квантног каскадног ласера. Утврђено је да код структура од интереса урачунавање овог типа расејања не доводи до појаве нових резонантних пикова у оптичком појачању, већ само до модификовања постојећих пикова. Такође, показано је да расејање електрона на неравнинама слојева постаје доминантније при слабом магнетним пољима и да се за оптимизацију оптичког појачања, посебно при слабом магнетном пољу, мора узети у обзир и наведени ефекат. На крају је описан ефикасан нумерички алгоритам за оптимизацију параметара активне области квантног каскадног ласера и израчунавање његових излазних карактеристика у магнетном пољу.

У шестом поглављу су изнети закључци, главна запажања и доприноси дисертације.

У прилозима су детаљно представљена следећа разматрања:

- Прилог „А“ – Детаљан аналитички прелаз са континуалног на дискретно израчунавање средње вредности и стандардне девијације перколационе густине у правоугаоним системима насумично распоређених штапића.

- Прилог „B“ – Пропагација стандардне грешке од њене аналитички одређене вредности за дискретну функцију вероватноће перколације до грешке средње перколационе концентрације и стандардне девијације.
- Прилог „C“ – Нумеричко израчунавање префактора и експонената у генерализованим функцијама скалирања средње вредности и стандардне девијације перколационе концентрације у правоугаоним системима насумично распоређених правих проводника.
- Прилог „D“ – Основни концепти методе конјугованих градијената са Јакобијевим прекондиционирањем.

### 3. ОЦЕНА ДИСЕРТАЦИЈЕ

#### 3.1. Савременост и оригиналност

Функционалност савремених наноелектронских уређаја се не може описати без примене одговарајућих статистичких метода и модела неопходних за разумевање различитих транспортних процеса. Зато су у дисертацији развијени и интегрисани различити приступи неопходни за разумевање транспортних процеса у системима са комплексном и неуређеном морфологијом. Коришћењем приказаних метода и алгоритама су анализирани, моделовани и оптимизовани савремени наноелектронски уређаји: прозирне електроде са неуређеним мрежама наножица, танкослојни транзистори са неуређеним мрежама угљеничних нанотуба и квантни каскадни ласери.

Прозирни проводници засновани на неуређеним мрежама металних наножица налазе примену у уређајима као што су соларне ћелије, органске ЛЕД диоде, екрани осетљиви на додир, итд. Њихова електрична проводност се нелинеарно повећава са променом концентрације наножица у зависности да ли је концентрација испод, у близини или далеко од прага перколације, док прозирност опада са растом концентрације. Модел који би описао електричну проводност мреже у функцији од концентрације наножица узимајући у обзир њихову проводност, проводност контаката и величину система до сада није наведен у литератури. Због тога је у дисертацији приказан свеобухватан модел којим се описује електрична проводност мреже у зависности од концентрације и проводности наножица, проводности контаката и величине система.

Угљеничне нанотубе су материјали са потенцијално великом применом у електронским уређајима као што транзистори, сензори и оптоелектронски уређаји првенствено због добре покретљивости носилаца наелектрисања на собној температури. Приликом производње транзистора формирају се дводимензионалне мреже угљеничних нанотуба са насумично распоређеним нанотубама од којих су приближно 2/3 нанотуба полупроводне, а преостале металне које не мењају своју проводност под утицајем напона на гејту. Негативан утицај металних нанотуба на електрична својства транзистора, због велике вероватноће директног спајања сорса и дрејна, тј. перколације само кроз металне нанотубе, представља тренутно највећу препреку за њихову ефикасну производњу. Различити поступци елиминације металних нанотуба током или након производње транзистора најчешће оштећују преостале нанотубе и додају различите нечистоће, што значајно смањује транспортна и електрична својства транзистора и повећава трошкове њихове производње. Због тога је у дисертацији показано да се негативан утицај металних нанотуба може превазићи избором одговарајућег облика и величине канала транзистора. Такође, развијен је аналитички модел за одређивање оптималне концентрације нанотуба у зависности од њихове дужине и димензије канала

транзистора са циљем добијања жељених транспортних и електричних својстава транзистора без примене било каквих додатних поступака селекције или уређења нанотуба током и/или након процеса синтезе.

Квантни каскадни ласери су нашли велику примену у електронским уређајима за детекцију гасова у малим концентрацијама, контролу загађења, сигурносни надзор, итд. Емитовање фотона у квантним каскадним ласерима је засновано на електронском транспорту између дискретних нивоа чији распоред зависи од димензија и састава полупроводничких слојева ласера, а може се додатно модулисати променом интензитета спољашњег магнетног поља. Сматра се да су брзине ових унутарзонских електронских прелаза доминантно одређене расејањем електрон-лонгитудинални оптички фонон. Међутим, у дисертацији је показано да расејање електрона на површинским неравнинама између слојева активне области значајно утиче на рад квантног каскадног ласера. Такође, показано је да расејање електрона на неравнинама слојева постаје доминантније при слабир магнетним пољима и да се за оптимизацију оптичког појачања, посебно при слабом магнетном пољу, мора узети у обзир и наведени ефекат. На основу тога је представљен нумерички алгоритам за оптимизацију димензија и структуре слојева у активној области у циљу емитовања светлости са унапред дефинисаном таласном дужином.

Због свега наведеног, резултати дисертације кандидата представљају оригиналан и изузетно значајан допринос разумевању транспортних процеса у наведеним наноелектронским уређајима омогућавајући њихово моделовање и оптимизацију коришћењем развијених модела.

### 3.2. Осврт на референтну и коришћену литературу

Током израде докторске дисертације кандидат је детаљно истражио најсавременију литературу и коректно навео релевантне радове из области докторске дисертације. Наведено је укупно 137 библиографских референци. Литература садржи најновије радове из рецензираног часописа, релевантне за проблематику истражену у дисертацији, што такође говори о актуелности и значају приказаних истраживања. Поред радова других аутора, у листи референци се налазе и радови самог кандидата у вези са предметом и темом докторске дисертације.

### 3.3. Опис и адекватност примењених научних метода

Сви резултати током израде дисертације су добијени помоћу симулација и нумеричких прорачуна. Алгоритми за моделовање транспортних процеса комплексних система се могу угрубо поделити на два дела: генерисање структуре система и рачунање транспортних карактеристика генерисане структуре.

Будући да је дужина наножица и угљеничних нанотуба много већа од њиховог пречника, њихове неуређене мреже се могу моделовати насумично распоређеним штапићима занемарљиве дебљине. За генерисање неуређених мрежа је примењен Монте Карло метод који помоћу псеудо-случајних бројева генерише позиције штапића у оквиру правоугаоне површине која представља основу прозирне електроде или канал транзистора. За потребу генерисања неуређених мрежа је развијен код у програмском језику C.

Када је правоугаона основа система већа од појединачних штапића за транспорт носилаца наелектрисања кроз систем неопходно је да постоји перколациона путања која се састоји од великог броја штапића који се додирују и тиме успостављају перколациони кластер који повезује крајеве система. За потребе израчунавања вероватноће и прага перколације је развијен алгоритам који се заснива на додавању новог штапића у систем, интеграцији свих

постојећих кластера са којима нови штапић интерагује у један нови кластер и провера да ли је новоформиран кластер перколациони. За потребу имплементације описаног алгоритма за детектовање перколације је развијен код у програмском језику C. Користећи развијени код кандидат је утврдио зависност између геометријских параметара (величине и облика система) и перколационих карактеристика система и показао да средње вредности густине перколације симетричних и асиметричних система зависе различито од величине система (конвергенција симетричних система ка перколационом прагу је бржа).

Електрична проводност појединачних штапића су описани проводношћу која зависи од њихове дужине (балистички или дифузни транспорт), док се контакти моделују различитим отпорницима у зависности да ли су штапићи који међусобно интерагују полупроводни или метални. Електрична проводности целе мреже је израчуната применом Кирхофових закона и решавањем добијеног система линеарних једначина са више од  $10^7$  непознатих. За потребе ефикасног решавања система линеарних једначина коришћен је итеративни метод конјугованих градијената развијен у програмском језику C. У циљу убрзавања конвергенције коришћено је Јакобијево прекодиционирање. За обраду резултата су развијени кодови у програмском пакету MATLAB. Користећи развијене кодове кандидат је испитао како електрична проводност насумично распоређених наножица зависи од њихове концентрације и проводности, проводности контаката и величине система. Такође, користећи наведене кодове кандидат је испитао како струја провођења и однос струје провођења и цурења транзистора заснованих на неуређеним мрежама угљеничних нанотуба зависе од њихових структурних (дужина тубе) и геометријских параметара (димензије канала).

Прорачун електронске структуре квантног каскадног ласера поларисаног путем спољашњег електричног поља у одсуству магнетног је извршен помоћу методе гађања. Овај метод директно одређује сопствене вредности енергије и таласне функције система у зависности од димензија и састава полупроводничких слојева активне области и интензитета примењеног електричног поља. Брзине расејања електрона при прелазима између Ландауових нивоа у присуству магнетног поља услед интеракције са лонгитудиналним оптичким фононима и површинским неравнинама су добијене помоћу нумеричких прорачуна заснованих на развијеном моделу, при чему је за просторну расподелу неравнина претпостављена Гаусова корелациона функција. Нумерички алгоритам за оптимизацију оптичког појачања квантног каскадног ласера је заснована на коришћењу алгоритма за симулирано одређивање. Нелинеарне брзинске једначине су решаване итеративно тако да су у свакој итерацији решавани систем линеарних једначина коришћењем метода конјугованих градијената. За решавање брзинских једначина и рачунање електронске структуре, одговарајућих времена релаксације и оптичког појачања квантног каскадног ласера у спољашњем магнетног поља јачине и до 60 T, при температурама до 300 K, су развијени кодови у програмском пакету MATLAB.

#### 3.4. Применљивост остварених резултата

Резултати које је кандидат Милан Жежељ приказао у докторској дисертацији имају веома важан научни и практични значај.

Приказани аналитички модел којим се ефикасно моделује електрична проводност мреже неуређених правих проводника у зависности од концентрације и проводности наножица, проводности контаката и величине система има велики практичан значај, што потврђују бројни експериментални радови који користе наведени модел као потврду измерених електричних особина практично реализованих прозирних електрода. Такође, наведени резултати омогућавају израчунавање оптималних вредности структурних и геометријских параметара прозирних електрода заснованих на неуређеним мрежама наножица у циљу

добијања максимале електричне проводности при унапред задатој оптичкој транспарентности.

Примена предложене методе за одређивање оптималних опсега концентрације и дужине нанотуба, ширине и дужине канала омогућава ефикасну производњу транзистора са униформним и практично прихватљивим транспортним и прекидачким својствима користећи минималан број производних корака.

Нумерички алгоритам који узима у обзир релевантне механизме расејања при транспорту електрона у квантном каскадном ласеру у спољашњем магнетном пољу се може применити за одређивање структуре и димензија слојева активне области у циљу добијања максималног оптичког појачања квантног каскадног ласера на унапред дефинисаној таласној дужини и температури.

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

Кандидат је кроз рад на дисертацији овладао научно-истраживачком методологијом и показао способност за самосталан истраживачки рад. Кандидат је током израде тезе такође показао способност да анализом литературе утврди шта је тренутна граница истраживања, обликује задату тему истраживања, одговорност да изведе истраживање прецизно и систематично, и самосталност код одабира нумеричких метода. Приликом израде дисертације овладао је коришћењем сложених рачунарских ресурса високих перформанси који су му били доступни на Институту за физику у Лабораторији за примену рачунара у науци. Самостално је развио кодове потребне за добијање и обраду свих приказаних резултата. Током рада на докторату учествовао је на више међународних конференција где је излагао (постере) и дискутовао о својим научним резултатима. Сви резултати истраживања су објављени у водећим међународним часописима и већи део текста објављених радова кандидат је самостално написао. У самој дисертацији су предмети и циљеви истраживања јасно дефинисани, јасно су представљене методе које су коришћене, а добијени резултати су на одговарајући начин представљени, анализирани и дискутовани. На основу свега наведеног се може закључити да је кандидат Милан Жежељ достигао висок ниво оспособљености за самосталан научно-истраживачки рад.

## **4. ОСТВАРЕНИ НАУЧНИ ДОПРИНОС**

### 4.1. Приказ остварених научних доприноса

Научни доприноси кандидата Милана Жежеља у оквиру докторске дисертације су:

- Систематски је испитан је утицај коначне величине система на перколациона својства насумично распоређених штапића (наножица и нанотуба) у правоугаоним системима са променљивим односом дужине и ширине.
- Утврђено је како експоненти и коефицијенти функције скалирања момената функције густине вероватноће перколације правоугаоног система зависе од односа његове дужине и ширине.
- Показано је да степени закон са универзалним експонентом из теорије перколације, коришћен у литератури, описује електричну проводност система само за концентрације које су у непосредној близини перколационог прага.

- Утврђена су два режима и изведени су експоненти који описују понашање система даље до перколационог прага.
- Аналитички модел који обихвата сва три режима (један у близини и два на густинама већим од прага прколације) је тестиран у широком опсегу концентрација.
- Предложен је метод за одређивање оптималних опсега концентрације и дужине нанотуба, ширине и дужине канала у оквиру којих се неуређена мрежа угљеничних нанотуба понаша као транзистор са униформним транспортним и прекидачким карактеристикама.
- Коришћењем предложеног метода утврђени су основни елементи дизајна транзистора са карбонским нанотубама који омогућавају ефикасну производњу транзистора са у пракси прихватљивим транспортним и прекидачким својствима користећи минималан број производних корака.
- Показано је да присуство површинских неравнина у квантном каскадном ласеру значајно утиче на излазне карактеристике ласера.
- Утврђено је да код структура од интереса урачунавање овог типа расејања не доводи до појаве нових резонантних пикова у оптичком појачању, већ само до модификовања постојећих пикова.

#### 4.2. Критичка анализа резултата истраживања

У литератури до сада није анализиран утицај коначне величине система на перколациона својства насумично распоређених правих проводника (наножица и нанотуба) у правоугаоним системима и поред тога што су реалне прозирне електроде и канали транзистора најчешће правоугаоног (асиметричног) облика. За симетричне системе добијен је експонент већи од оног који предвиђа теорија перколације. У дисертацији је први пут систематски одређена зависност скалирања са величином система момената функције густине расподеле перколације правих проводника од односа дужине и ширине правоугаоног канала. Користећи предложени модел за прва два перколациона момента потврђено је да се вероватноћа перколације може моделовати Гаусовом расподелом. Тиме је први пут до сада омогућено ефикасно израчунавање вероватноће перколације на унапред задатој концентрацији само на основу геометријских параметара система (дужине и ширине) и дужине штапића.

У литератури је досад коришћен искључиво степени закон да би се описала електрична проводност неуређене мреже наножица, не само у близини перколационог прага већ и за веома густе мреже. Као резултат добијане су различите вредности експонента које су зависиле од концентрације наножица, као и од проводности контаката и наножица. Показано је да степени закон коришћен у литератури описује проводност система само за концентрације које су у непосредној близини перколационог прага и добијени су други експоненти који одрђују понашање системе на вечим густинама од перколационог прага.

Негативан утицај металних нанотуба на електрична својства транзистора због могућности кратког спајања металном везом сорса и дрејна, тј. перколације кроз металне нанотубе, представља тренутно највећу препреку за њихову ефикасну и масовну производњу и примену. До сада су коришћени различити поступци елиминације металних нанотуба током или након производње транзистора. Нажалост, наведени поступци оштећују преостале нанотубе и додају различите нечистоће, што значајно смањује транспортна и електрична својства транзистора и повећава трошкове њихове производње. У дисертацији је показано да

се негативан утицај металних нанотуба може превазићи избором одговарајућег облика и величине канала транзистора. У дисертацији је предложена процедура за одређивање оптималних опсега концентрације и дужине нанотуба, ширине и дужине канала у оквиру којих се неуређена мрежа угљеничних нанотуба понаша као транзистор са униформним транспортним и прекидачким карактеристикама без примене било каквих додатних поступака селекције или уређења нанотуба током и/или након процеса синтезе. Поред тога, у дисертацији је спроведена прва детаљна студија утицаја дужине нанотуба на транспортна својства мреже, почев од веома кратких нанотуба код којих је доминантан балистички транспорт електрона, до веома дугачких код којих доминира дифузни транспорт.

Емитовање фотона у квантним каскадним ласерима је засновано на електронском транспорту између дискретних нивоа чији распоред зависи од димензија и састава полупроводничких слојева ласера, а може се додатно модулисати променом интензитета спољашњег магнетног поља. У литератури се сматра да су брзине ових унутарзонских електронских прелаза у квантним каскадним ласерима доминантно одређене расејањем електрон-лонгитудинални оптички фонон. Међутим, у дисертацији је детаљно разматран и утицај расејања електрона на површинским неравнинама између слојева активне области квантног каскадног на његове излазне карактеристике. У дисертацији је показано да расејање електрона на површинским неравнинама између слојева активне области значајно утиче на рад квантног каскадног ласера. Такође, показано је да расејање електрона на неравнинама слојева постаје доминантније при слабијим магнетним пољима и да се за оптимизацију оптичког појачања, посебно при слабом магнетном пољу, мора узети у обзир и наведени ефекат. По први пут је предложен ефикасан нумерички алгоритам за оптимизацију и израчунавање излазних карактеристика квантног каскадног ласера који истовремено узима у обзир оба наведена механизма расејања, тј. расејање електрона на лонгитудиналним оптичким фононима и на површинским неравнинама, при различитим интензитетима спољашњег магнетног поља и различитим температурама.

#### 4.3. Верификација научних доприноса

Током своје досадашње научне каријере кандидат Милан Жежељ је постигао изузетне резултате објавивши 4 рада у врхунским међународним часописима (категорије M21) и један рад у међународном часопису изузетних вредности (категорије M21a). Истраживања објављена у часописима категорије M21 на којима је кандидат први аутор чине основ за докторску дисертацију кандидата. Такође, делови истраживања из дисертације кандидата су приказани у часопису категорије M21a на којем је кандидат други аутор. Поред тога, кандидат је коаутор на раду у тематском зборнику водећег међународног значаја (категорија M13) и на шест саопштења са међународних скупова штампана у изводу (категорија M34).

#### **Радови у међународним часописима изузетних вредности (M21a):**

1. Smiljanić J., **Žeželj M.**, Milanović V., Radovanović J., Stanković I.: MATLAB-Based Program for Optimization of Quantum Cascade Laser Active Region Parameters and Calculation of Output Characteristics in Magnetic Field, *Comput. Phys. Commun.*, vol. 185, no. 3, pp. 998 – 1006, 2014 (DOI: 10.1016/j.cpc.2013.10.025, **IF (2014): 3.112**, ISSN: 0010-4655).

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

1. **Žeželj M.**, Milanović V., Radovanović J., Stanković I.: Influence of Interface Roughness Scattering on Output Characteristics of GaAs/AlGaAs Quantum Cascade Laser in a Magnetic Field, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, vol. 44, no. 32, pp. 325105-1 – 325105-7, 2011 (DOI: 10.1088/0022-3727/44/32/325105, **IF (2011): 2.544**, ISSN: 0022-3727).

2. **Žeželj M.**, Stanković I., Belić A.: Finite-Size Scaling in Asymmetric Systems of Percolating Sticks, *Phys. Rev. E*, vol. 85, no. 2, pp. 021101-1 – 021101-6, 2012 (DOI: 10.1103/PhysRevE.85.021101, **IF (2012): 2.313**, ISSN: 1539-3755).
3. **Žeželj M.**, Stanković I.: From Percolating to Dense Random Stick Networks: Conductivity Model Investigation, *Phys. Rev. B*, vol. 86, no. 13, pp. 134202-1 – 134202-6, 2012 (DOI: 10.1103/PhysRevB.86.134202, **IF (2012): 3.767**, ISSN: 1098-0121).
4. **Žeželj M.**, Stanković I.: Random Networks of Carbon Nanotubes Optimized for Transistor Mass-Production: Searching for Ultimate Performance, *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 31, no. 10, pp. 105015-1 – 105015-8, 2016 (DOI: 10.1088/0268-1242/31/10/105015, **IF (2015): 2.098**, ISSN: 0268-1242).

#### Радови у тематским зборницима водећег међународног значаја (M13):

1. Stanković I., **Žeželj M.**, Smiljanić J., Belić A.: Modelling of Disaster Spreading Dynamics, in *High-Performance Computing Infrastructure for South East Europe's Research Communities, Springer Book Series on Modeling and Optimization in Science and Technologies*, vol. 2, pp. 31 – 42, 2014 (DOI: 10.1007/978-3-319-01520-0\_4, ISSN: 2196-7326, ISBN: 978-3-319-01519-4).

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

1. **Žeželj M.**, Stanković I., Belić A.: “Resistance in Percolating Quasi 1D and 2D Networks of Nanofibers”, *75th Annual Meeting of the DPG and Combined DPG Spring Meeting*, Dresden, Germany, 13 – 18 March 2011, Poster DY 40.17, Conference Book, p. 334 (ISSN: 0420-0195).
2. **Žeželj M.**, Stanković I., Milanović V., Radovanović J.: “Influence of Interface Roughness on Relaxation Rates and Optical Gain in a Quantum Cascade Laser”, *75th Annual Meeting of the DPG and Combined DPG Spring Meeting*, Dresden, Germany, 13 – 18 March 2011, Poster HL 85.54, Conference Book, p. 376 (ISSN: 0420-0195).
3. **Žeželj M.**, Stanković I.: “Investigation of Influence of Finite-Size Scaling and Aspect Ratio on Stick Percolation”, *XVIII National Symposium on Condensed Matter Physics – SFKM 2011*, Belgrade, Serbia, 18 – 22 April 2011, Poster 35, Book of Abstracts, p. 103 (ISSN:-, ISBN:-).
4. **Žeželj M.**, Stanković I., Belić A.: “Investigation of Interplay Between Finite-Size Scaling and Aspect Ratio in Continuum Percolating Networks”, *8th Liquid Matter Conference*, Vienna, Austria, 6 – 10 September 2011, Poster P4.67, Conference Book, p. 245 (ISBN: 2-914771-71-1).
5. Stanković I., Belić A., **Žeželj M.**: “Aggregation Kinetics of Short-Range Attractive Particles: Brownian Dynamics Simulations vs. Smoluchowski Equation”, *8th Liquid Matter Conference*, Vienna, Austria, 6 – 10 September 2011, Poster P8.55, Conference Book, p. 279 (ISBN: 2-914771-71-1).
6. **Žeželj M.**, Stanković I., Belić A.: “Study of Transistor Performance of Carbon Nanotube Networks”, *76th Annual Conference of the DPG and Spring Meeting of the Condensed Matter Section*, Berlin, Germany, 25 – 30 March 2012, Presentation DY 2.9, Conference Book, p. 187 (ISSN: 0420-0195).

## 5. ЗАКЉУЧАК И ПРЕДЛОГ

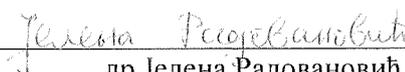
На основу свега наведеног, Комисија констатује да докторска дисертација кандидата Милана Жежеља, мастер инжењера електротехнике и рачунарства, под насловом „Modeling and optimization of transport processes in modern nanoelectronic devices“ („Моделовање и оптимизација транспортних процеса у савременим наноелектронским уређајима“), испуњава све формалне и суштинске услове предвиђене Законом о високом образовању, као и прописима Универзитета у Београду и Електротехничког факултета.

Научне резултате проистекле из истраживања спроведеног у оквиру докторске дисертације кандидат је представио стручној јавности на међународним конференцијама и објавио у врхунским међународним часописима, потврђујући тиме њихову актуелност и оригиналност. Наведени научни резултати имају изражену нумеричку компоненту и за њихову реализацију су били потребни значајни рачунарски ресурси доступни на Институту за физику у Лабораторији за примену рачунара у науци. На основу увида у докторску дисертацију и радове кандидата, комисија констатује да дисертација представља оригиналан, савремен и практично применљив научни допринос, као и да је кандидат током израде дисертације показао изражену способност за самосталан научно-истраживачки рад.

Комисија предлаже Наставно-научном већу да се докторска дисертација под називом „Modeling and optimization of transport processes in modern nanoelectronic devices“ („Моделовање и оптимизација транспортних процеса у савременим наноелектронским уређајима“) кандидата Милана Жежеља прихвати, изложи на увид јавности и упути на коначно усвајање Већу научних области техничких наука Универзитета у Београду.

У Београду, 30. 11. 2016. године

### ЧЛАНОВИ КОМИСИЈЕ



др Јелена Радовановић, редовни професор  
Универзитет у Београду – Електротехнички факултет



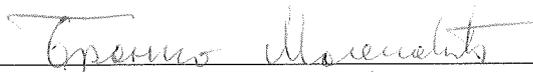
др Витомир Милановић, професор емеритус  
Универзитет у Београду – Електротехнички факултет



др Игор Станковић, виши научни сарадник  
Универзитет у Београду – Институт за физику у Београду



др Јован Радуновић, редовни професор у пензији  
Универзитет у Београду – Електротехнички факултет



др Бранко Малешевић, ванредни професор  
Универзитет у Београду – Електротехнички факултет

