

НАСТАВНО–НАУЧНОМ ВЕЋУ ФИЗИЧКОГ ФАКУЛТЕТА УНИВЕРЗИТЕТА У БЕОГРАДУ

Пошто смо на VI седници Наставно–научног већа Физичког факултета Универзитета у Београду одржаној 22.04.2026. одређени за чланове Комисије за припрему извештаја о докторској тези *Quantum Monte Carlo Study of Polaron Mobility* (наслов на српском језику *Проучавање покретљивости поларона користећи квантне Монте Карло методе*) из научне области Физика кондензоване материје и статистичка физика, коју је мастер физичар Сузана Миладић предала Физичком факултету у Београду дана 20.04.2026, подносимо следећи

Р Е Ф Е Р А Т

1. ОСНОВНИ ПОДАЦИ О КАНДИДАТУ

1.1. Биографски подаци

Сузана Миладић је рођена 03.01.1995. у Новом Саду, Република Србија. Након завршене основне школе у Бачкој Паланци, школовање наставља у Средњој медицинској школи у Новом Саду коју завршава 2014. године. Основне академске студије на Департману за физику Природно-математичког факултета Универзитета у Новом Саду започиње 2014. и завршава 2018. године. Исте године уписује мастер академске студије на Физичком факултету Универзитета у Београду, смер Теоријска и експериментална физика. Назив мастер физичара стиче септембра 2019. године одбранивши мастер рад *Спинска резонанца и релаксација у квантним тачкама унутар InSb наножјица* који је израдила под руководством проф. др Едиба Добарцића, ванредног професора Физичког факултета у Београду. За тај рад је примила награду *проф. др Љубомир Ћирковић* за најбољи мастер рад одбрањен на Физичком факултету током академске 2018/19. године.

Докторске академске студије на Физичком факултету Универзитета у Београду, научна област Физика кондензоване материје и статистичка физика, уписује 2019. године. Од децембра 2019. године је запослена у Институту за физику у Београду, Институту од националног значаја за Републику Србију, у Лабораторији за примену рачунара у науци Центра за изучавање комплексних система, најпре као истраживач приправник, а од 2023. године као истраживач сарадник.

1.2. Научна активност

Научна активност Сузана Миладић током докторских студија је усредсређена на проучавање динамике транспорта носилаца наелектрисања у моделима са електрон–фонон интеракцијом. Радећи под руководством др Ненада Вукмировића, научног саветника Института за физику у Београду, развила је

нумерички егзактан приступ за рачунање покретљивости носилаца наелектрисања базиран на квантном Монте Карло методу у оквиру формализма интеграла по трајекторијама. Развијени приступ је применила за добијање температурски-зависне покретљивости носилаца у једнодимензионалном Холштајновом моделу. Добијени нумерички егзактни резултати су јој омогућили да конструише дијаграм транспортних режима Холштајновог поларона и одреди домене важења најпознатијих приближних теорија транспорта. Закључила је да се физичка слика транспорта у готово читавом простору параметара једнодимензионалног Холштајновог модела може свести на слику зонског транспорта, транспорта прескакањем или поларонског зонског транспорта.

Резултате добијене током докторских студија је објавила у два рада у часопису *Physical Review B* и представила на неколико међународних конференција и школа. Од јануара 2024. године учествује у реализацији пројекта Фонда за науку Републике Србије *Polaron Mobility in Model Systems and Real Materials* (позив ПРИЗМА, ев. бр. 5468, акроним PolMoReMa) којим руководи др Ненад Вукмировић. У оквиру интерног позива *Програм за младе истраживаче* Института за физику у Београду, током 2024. је руководила пројектом о транспорту поларона који је финансиран из средстава SEED инструмента пројекта SAIGE (Serbia Accelerating Innovation and Entrepreneurship Project).

Током мастер студија, Сузана Миладић је радила на разумевању ефеката који настају као последица спин–орбит спреге и фононски-индуковане релаксације у полупроводничким наноструктурама. Резултате добијене током мастер студија је објавила у једном раду у часопису *Physical Review B*.

2. ОПИС ПРЕДАТОГ РАДА

2.1. Основни подаци

Докторска теза *Quantum Monte Carlo Study of Polaron Mobility* (наслов на српском језику *Проучавање покретљивости поларона користећи квантне Монте Карло методе*) је израђена под руководством др Ненада Вукмировића, научног саветника Института за физику у Београду. Ментор испуњава све Физичког факултета и Универзитета у Београду за руковођење израдом докторске дисертације: у научном је звању и аутор је преко 65 радова из области физике кондензоване материје, који су објављени у врхунским међународним часописима и представљени на бројним међународним конференцијама.

Теза је написана на енглеском језику на 129 страна (не рачунајући насловне стране, стране са сажецима на српском и енглеском језику, захвалницу, листе слика и табела, садржај и биографију). Садржај тезе је подељен у пет поглавља, док пет додатака допуњују главни текст детаљима о коришћеним теоријским и нумеричким техникама. Теза садржи 31 слику и 3 табеле и позива укупно 144 референце.

2.2. Предмет и циљ рада

Предмет докторске тезе Сузана Миладић је транспорт носилаца наелектрисања у системима са електрон–фонон интеракцијом. Истраживање је мотивисано потребом разумевања фундаменталних механизма транспорта у органским полупроводницима, који се у последњих неколико деценија проучавају са циљем развоја економски исплативе и еколошки прихватљиве електронике нове генерације. Главна тешкоћа приликом описа динамике наелектрисања у органским полупроводницима лежи у чињеници да су све релевантне енергијске скале (кинетишка енергија носилаца, енергија фонона и енергија електрон–фонон интеракције) међусобно упоредиве. То отвара питање применљивости стандардних приступа, заснованих на постојању малог параметра по којем се врши пертурбативни развој, за проучавање транспортних својстава ових материјала.

У последње време се интензивно развијају нумерички егзактне методе за проучавање квантне динамике међусобно спрегнутих електрона и фонона. Такве методе су нептурбативне и не уводе никакве претпоставке, попут горе поменуте о постојању малог параметра, па стога могу да унапреде фундаментално разумевање транспорта наелектрисања у системима карактерисаним конвергенцијом релевантних енергијских скала. Додатно, поређењем приближних и нумерички егзактних резултата се могу остварити значајни нови увиди у домен важења широко коришћених приближних метода.

Један од најпознатијих нумерички егзактних метода је квантни Монте Карло метод. Међутим, његова применљивост у домену реалног времена је ограничена динамичким проблемом знака, чија израженост зависи од репрезентације у којој се прорачун спроводи. С друге стране, квантни Монте Карло метод у имагинарном времену не пати од проблема знака (уколико се разматра само један носилац наелектрисања у пољу фонона). Међутим, за добијање података о динамици транспорта неопходно је прибећи поступку нумеричког аналитичког продужења резултата са имагинарне на реалну осу, који је неједнозначан и непоуздан.

Независно од динамичког проблема знака и нумеричког аналитичког продужења, примена квантних Монте Карло метода (и нумерички егзактних метода уопште) је у великој мери ограничена на моделне Хамилтонијане. Најједноставнији такав Хамилтонијан релевантан за транспорт носилаца наелектрисања у органским полупроводницима је Холштајнов Хамилтонијан, у којем је један носилац локално и линеарно спрегнут са померајима атома кристалне решетке из равнотежног положаја.

Циљ докторске тезе Сузана Миладић је развој нумерички егзактног оквира базираног на квантном Монте Карло методу у формализму интеграла по трајекторијама и његова примена за унапређење разумевања транспорта наелектрисања у једнодимензионалном Холштајновом моделу.

У оквиру теоријско-методолошког дела ове тезе, Сузана Миладић је показала како се динамички проблем знака у квантним Монте Карло прорачунима у реалном времену може умањити, односно како се домет прорачуна може повећати, погодним одабиром базиса у којем се прати еволуција носиоца наелектрисања. Наиме, у режимима слабе електрон–фонон интеракције је погодније пратити кретање носиоца у базису својствених стања оператора импулса, док је при јачим

интеракцијама погодније радити у базису својствених стања оператора координате. Комбиновањем тако добијених података у реалном времену са резултатима квантних Монте Карло прорачуна у имагинарном времену, и њиховим подвргавањем поступку сингуларне декомпозиције својствених вредности, Сузана Миладић је показала побољшање исхода поступка нумеричког аналитичког продужења у односу на случај када се користе само подаци у имагинарном времену. То јој је омогућило да добије нумерички егзактне резултате за температурски зависну покретљивост носилаца у једнодимензионалном Холштајновом моделу у режимима параметара који остају изазовни за друге нумерички егзактне методе.

У оквиру дела усредсређеног на нове физичке увиде, Сузана Миладић је искористила развијену методологију за класификацију транспортних режима Холштајновог поларона. Поређењем нумерички егзактних и приближних резултата за струја–струја корелациону функцију у имагинарном и/или реалном времену, показала је да се физичка слика транспорта у готово читавом простору параметара модела своди на неку од три најпознатије слике транспорта, зонски транспорт, транспорт прескакањем или поларонски зонски транспорт. Одредила је домене важења ових слика транспорта и анализирала је прелазе међу њима, који се дешавају при умереним интеракцијама и температурама.

2.3. Публикације

Резултати представљени у докторској тези Сузана Миладић су објављени у два рада у међународном часопису *Physical Review B*.

[A2] **S. Miladić** and N. Vukmirović,
Method for obtaining polaron mobility using real and imaginary time path-integral quantum Monte Carlo,
Phys. Rev. B **107**, 184315 (2023).
DOI: 10.1103/PhysRevB.107.184315
Категорија **M21**, ИФ2023 = 3,2

[A3] **S. Miladić** and N. Vukmirović,
Identification of the transport regimes of the one-dimensional Holstein model,
Phys. Rev. B **112**, 054314 (2025).
DOI: 10.1103/t1g7-r95d
Категорија **M21**, ИФ2024 = 3,7

Ови радови су до сада цитирани укупно **10** пута, односно **8** пута без аутоцитата и цитата коаутора (према бази Scopus на дан 22.04.2026).

2.4. Преглед научних резултата изложених у тези

Докторска теза Сузана Миладић се састоји од пет поглавља и пет додатака.

У **првом поглављу** је изложена мотивација за развој теоријских и нумеричких приступа за опис транспорта наелектрисања у системима са

електрон–фонон интеракцијом. Мотивација је усредсређена на органске полупроводнике, у којима су све енергијске скале релевантне за транспорт међусобно упоредиве. Објашњено је зашто то води специфичном режиму транспорта који се, у општем случају, не може сврстати ни у један од познатих режима. Ови режими се ослањају на постојање мале енергијске скале у проблему и формулисање пертурбативне теорије по тој скали. Изложени су најчешће коришћени теоријски и нумерички приступи који надграђују поменуте пертурбативне теорије и укратко су размотрене њихове предности и слабости. Описана је структура тезе.

Друго поглавље поставља теоријску основу за изучавање транспорта наелектрисања у системима са електрон–фонон интеракцијом. Уведен је Холштајнов модел, на који се даље истраживање фокусира, и његова временски зависна струја–струја корелациона функција на коначној температури као средишња величина за опис транспорта. Детаљно су размотрени најпознатији режими транспорта Холштајновог поларона: зонски транспорт, транспорт прескакањем и поларонски зонски транспорт. Уведена је репрезентација квантне статистичке механике коришћењем интеграла по трајекторијама. Поглавље се завршава прегледом квантних Монте Карло метода, са посебним освртом на формулацију метода у оквиру формализма интеграла по трајекторијама. Размотрен је динамички проблем знака, који ограничава примену квантног Монте Карло метода у реалном времену. Описана је општа процедура нумеричког аналитичког продужења, којом се на основу квантних Монте Карло података у имагинарном времену реконструише динамика у реалном времену.

Треће поглавље садржи главне теоријско-методолошке резултате ове тезе, који су објављени у раду [А2]. Оно подробно приказује развој квантног Монте Карло метода за рачунање динамике струја–струја корелационе функције једнодимензионалног Холштајновог модела. Корелациона функција је репрезентована у оквиру формализма интеграла по трајекторијама, дискретизацијом еволуционих оператора у реалном и имагинарном времену и коришћењем Тротер–Сузуки декомпозиције. Размотрене су две комплементарне формулације, у којима се еволуција стања електрона прати у реалном и импулсном простору, са циљем смањења динамичког проблема знака и повећања домета квантних Монте Карло симулација у реалном времену. Показано је да је праћење еволуције стања електрона у реалном простору погодније у режимима јаке електрон–фонон интеракције, док је при слабој интеракцији боље радити у импулсном простору. Приказан је поступак нумеричког аналитичког продужења који комбинује податке о корелационим функцијама у имагинарном и реалном времену. Показано је да такав поступак повећава поузданост нумеричког аналитичког продужења у односу на случај када се користе само квантни Монте Карло подаци у имагинарном времену. Треће поглавље кулминира представљањем нумерички егзактних резултата за струја–струја корелациону функцију и температурску зависност покретљивости Холштајновог поларона у режимима параметара који представљају изазов за све нумерички егзактне методе.

Четврто поглавље садржи главне нумеричке резултате и физичке увиде остварене у овој тези, који су објављени у раду [А3]. Описан је поступак за идентификацију транспортних режима једнодимензионалног Холштајновог модела

поређењем квантних Монте Карло резултата за струја–струја корелациону функцију у имагинарном времену са одговарајућим резултатима у оквирима приближних теорија зонског транспорта, транспорта прескакањем и поларонског зонског транспорта. Поређење корелационих функција у имагинарном времену омогућава разматрање широког опсега моделних параметара. Поузданост таквог поступка је значајно подржана поређењем резултата за покретљивост и/или струја–струја корелациону функцију у реалном времену у режимима параметара у којима су нумерички егзактни резултати доступни. Резултати показују да зонски транспорт доминира при слабирим интеракцијама и на ниским температурама, док се при јаким интеракцијама и на високим температурама опажа транспорт прескакањем. Поларонски зонски транспорт је доминантан механизам транспорта при јаким интеракцијама и на ниским температурама. Закључено је да се транспорт у практично читавом простору параметара Холштајновог модела може веома добро описати коришћењем неке од три размотрене приближне теорије. У режимима умерено јаке интеракције и на умерено високим температурама, транспорт је анализиран у терминима прелаза између физичких слика размотрених приближних теорија.

У петом поглављу су сумирани закључци ове тезе. Најважнији је да квантни Монте Карло метод у комбинацији са формализмом интеграла по трајекторијама пружа адекватан опис транспорта Холштајновог модела у различитим режимима и служи као добра референца за процену тачности приближних метода.

Додаци садрже техничке детаље развијених теоријских и нумеричких приступа. Додатак А даје детаље конструкције интеграла по трајекторијама у случају када се еволуција носиоца наелектрисања прати у импулсном простору. Додатак Б детаљно описује коришћени поступак нумеричког аналитичког продужења, који се ослања на сингуларну декомпозицију својствених вредности примењену на комбиноване квантне Монте Карло податаке у имагинарном и реалном времену. У додатку Ц су сумирани технички детаљи извршених квантних Монте Карло прорачуна. Додатак Д садржи детаље приближних прорачуна у оквирима зонског и поларонског зонског транспорта. У додатку Е се подробније анализирају прелазни режими моделих параметара, у којима се транспорт не може једнозначно придружити неком од три размотрена режима транспорта.

3. СПИСАК ПУБЛИКАЦИЈА КАНДИДАТА

А. Радови у међународним часописима

Радови у водећим међународним часописима (ИФ>1)

[A1] S. Miladić, P. Stipsić, E. Dobardžic, and M. Milivojević, *Electrical Control of a Spin Qubit in InSb Nanowire Quantum Dots: Strongly Suppressed Spin Relaxation in High Magnetic Field*, Phys. Rev. B **101**, 155307 (2020).
doi: 10.1103/PhysRevB.101.155307

Категорија **M21**, ИФ2020 = 4,036

[A2] **S. Miladić** and N. Vukmirović,
Method for obtaining polaron mobility using real and imaginary time path-integral quantum Monte Carlo,
Phys. Rev. B **107**, 184315 (2023).
DOI: 10.1103/PhysRevB.107.184315
Категорија **M21**, ИФ2023 = 3,2

[A3] **S. Miladić** and N. Vukmirović,
Identification of the transport regimes of the one-dimensional Holstein model,
Phys. Rev. B **112**, 054314 (2025).
DOI: 10.1103/t1g7-r95d
Категорија **M21**, ИФ2024 = 3,7

4. ЦИТАТИ

[A1] **S. Miladić**, P. Stipsić, E. Dobardžic, and M. Milivojević, Phys. Rev. B **101**, 155307 (2020).

1. Xue H.-B., Jing H.-Y., Chin. J. Phys. 96, 309 (2025).
2. Allhibi H., Aljuaydi F., Hessian H.A., Mohamed A.-B.A., Physica E 173, 116317 (2025).
3. Zhang Z., Dong J., Hu H., Guo Y., Liu H., J. Appl. Phys. 137, 193902 (2025).
4. Korolkov R., Bereznyi O., Korotun A., Proceedings of the 2025 IEEE 15th International Conference "Nanomaterials: Applications and Properties", pp. UBMP041 - UBMP046 (2025).
5. Mimona M.A., Mobarak M.H., Ahmed E., Kamal F., Hasan M., Heliyon 10, e31940 (2024).
6. Czarniecki J., Bertoni A., Goldoni G., Wójcik P., Phys. Rev. B 109, 085411 (2024).
7. Rahimi F., Kazerani Vahdani M.R., J. Magn. Magn. Mater. 591, 171660 (2024).
8. Milivojević M., Phys. Rev. B 104, 235304 (2021).
9. Milivojević M., Physica E 128, 114474 (2021).
10. Stavrou V.N., Physica E 130, 114605 (2021).
11. Zamani N., Keshavarz A., Nadgaran H., Eur. Phys. J. D 74, 120 (2020).
12. Al-Toki H.G., Al-Khursan A.H., Opt. Quantum Electron. 52, 467 (2020).

[A2] **S. Miladić** and N. Vukmirović, Phys. Rev. B **107**, 184315 (2023).

1. Lihm J.-M., Poncé S., Phys. Rev. X 16, 011008 (2026).
2. Miladić S., Vukmirović N., Phys. Rev. B 112, 054314 (2025).
3. Kovač K., Bonča J., Phys. Rev. B 109, 064304 (2024).
4. Janković V., J. Chem. Phys. 159, 094113 (2023).
5. Wang Y., Liu Z., Adv. Funct. Mater. 36, 2423252 (2026).
6. Mitrić P., Phys. Rev. B 111, 195140 (2025).

7. Janković V., Mitrić P., Tanasković D., Vukmirović N., Phys. Rev. B, 109, 214312 (2024).
8. Janković V., Phys. Rev. B 112, 035111 (2025).
9. Birschitzky V.C., Leoni L., Reticcioli M., Franchini C., Phys. Rev. Lett. 134, 216301 (2025).

[A3] **S. Miladić** and N. Vukmirović, Phys. Rev. B **112**, 054314 (2025).

1. Takahashi H., Borrelli R., J. Chem. Phys. 163, 194105 (2025).

5. ОЦЕНА ИЗВЕШТАЈА О ПРОВЕРИ ОРИГИНАЛНОСТИ ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

ОЦЕНА ИЗВЕШТАЈА О ПРОВЕРИ ОРИГИНАЛНОСТИ ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

На основу Правилника о поступку провере оригиналности докторских дисертација које се бране на Универзитету у Београду и налаза у извештају из програма iThenticate којим је извршена провера оригиналности докторске дисертације „Quantum Monte Carlo Study of Polaron Mobility” (“Проучавање покретљивости поларона користећи квантне Монте Карло методе”), аутора Сузана Миладић, констатујем да утврђено подударане текста износи 1%. Приликом провере оригиналности програмом iThenticate искључени су претходно публиковани резултати истраживања докторандкиње и подешена је опција “Exclude matches that are less than 15 words”. Овај степен подударности последица је коришћења стандардних математичких формула и текста захвалнице, тзв. општих места и података, што је у складу са чланом 9. Правилника.

На основу свега изнетог, а у складу са чланом 8. став 2. Правилника о поступку провере оригиналности докторских дисертација које се бране на Универзитету у Београду, изјављујем да извештај указује на оригиналност докторске дисертације, те се прописани поступак припреме за њену одбрану може наставити.

6. мај 2026. године

Ментор



др Ненад Вукмировић
научни саветник
Универзитет у Београду – Институт
за физику у Београду

З А К Л Ј У Ч А К

На основу свега изложеног, Комисија закључује да докторска теза Сузане Миладић под насловом *Quantum Monte Carlo Study of Polaron Mobility (Проучавање покретљивости поларона користећи квантне Монте Карло методе)* даје оригиналан и значајан допринос физици кондензованог стања материје. Кандидаткиња је остварила како теоријско-методолошке помаке, тако и нове физичке увиде на пољу транспорта наелектрисања у системима са електрон–фонон интеракцијом. Остварени резултати су објављени у два рада у врхунским међународним часописима. Комисија констатује да су задовољени сви прописани услови за одобравање одбране тезе. Стога, предлажемо Наставно–научном већу Физичког факултета да одобри њену јавну одбрану.

У Београду, 06.05.2026.

Чланови комисије

проф. др Ђорђе Спасојевић
редовни професор
Физички факултет Универзитета у Београду

проф. др Божидар Николић
ванредни професор
Физички факултет Универзитета у Београду

др Вељко Јанковић
виши научни сарадник
Институт за физику у Београду