



**Univerzitet Crne Gore
Prirodno-matematički fakultet**

Džordža Vašingtona b.b.
1000 Podgorica, Crna Gora

tel: +382 (0)20 245 204
fax: +382 (0)20 245 204
www.pmf.ac.me

Broj: 1532/11

Datum: 23 07 2021

**Univerzitet Crne Gore
S e n a t u
Odboru za doktorske studije**

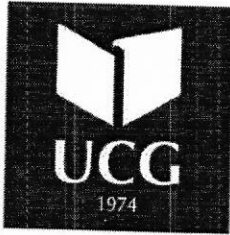
U prilogu Vam dostavljamo Predlog Odluke Vijeća Prirodno-matematičkog fakulteta sa sjednice od 22. 07. 2021. godine o usvajanju Izvještaja komisije za ocjenu polaznih istraživanja i podobnosti doktorske teze kandidata MSc Božidara Šoškića, na dalje postupanje.

S poštovanjem,

22 Dekan,

Prof. dr Predrag Miranović





Univerzitet Crne Gore
Prirodno-matematički fakultet

Džordža Vašingtona b.b.
1000 Podgorica, Crna Gora

tel: +382 (0)20 245 204

fax: +382 (0)20 245 204

www.pmf.ac.me

Broj: 1532

Datum: 22.07.2021

Na osnovu člana 64 Statuta Univerziteta Crne Gore, a u vezi sa članom 35 stav 3 Pravila doktorskih studija, na LXV sjednici Vijeća održanoj 22.07.2021. godine, donijeta je

ODLUKA

I

Usvaja se godišnji Izveštaj komisije za ocjenu prijave doktorske disertacije pod nazivom "Magnetizam i superprovodljivost u 2D materijalima" kandidata mr Božidara Šoškića, studenta doktorskih studija na Prirodno-matematičkom fakultetu - studijski program Fizika.

II

Odluka se dostavlja Centru za doktorske studije Univerziteta Crne Gore.

DEKAN
Prof. dr Predrag Miranović
Prof. dr Predrag Miranović

OCJENA PODOBNOSTI DOKTORSKE TEZE I KANDIDATA

OPŠTI PODACI O DOKTORANDU	
Titula, ime i prezime	Mr Božidar Šoškić
Fakultet	Prirodno-matematički fakultet
Studijski program	Fizika
Broj indeksa	2/18
Podaci o magistarskom radu	„Magnetne primjese u dvodimenzionalnim materijalima sa tačkastim strukturnim defektima“, Fizika čvrstog stanja, Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet Crne Gore, 14.12.2018. godine, A (10.00)
NASLOV PREDLOŽENE TEME	
Na službenom jeziku	Magnetizam i superprovodljivost u 2D materijalima
Na engleskom jeziku	Magnetism and superconductivity in 2D materials
Datum prihvatanja teme i kandidata na sjednici Vijeća organizacione jedinice	22. jul 2021
Naučna oblast doktorske disertacije	Fizika čvrstog stanja
Za navedenu oblast matični su sljedeći fakulteti	
Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet Crne Gore	
A. IZVJEŠTAJ SA JAVNE ODBRANE POLAZNIH ISTRAŽIVANJA DOKTORSKE DISERTACIJE	
<p>Javna odbrana polaznih istraživanja doktoranda mr Božidara Šoškića, pod nazivom „Magnetizam i superprovodljivost u 2D materijalima“ održana je u srijedu 30.06.2021. godine u Svečanoj sali tehničkih fakulteta sa početkom u 11:00 h, u prisustvu komisije u sastavu:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Prof. dr Borko Vujičić, redovni profesor Prirodno-matematičkog fakulteta Univerziteta Crne Gore; 2. Prof. dr Jovan Mirković, redovni profesor Prirodno-matematičkog fakulteta Univerziteta Crne Gore; 3. Dr Zorica Popović, docent Fizičkog fakulteta Univerziteta u Beogradu; 4. Dr Željko Šljivančanin, naučni savjetnik Instituta za nuklearne nauke „Vinča“ u Beogradu; 5. Prof. dr Predrag Miranović, redovni profesor Prirodno-matematičkog fakulteta Univerziteta Crne Gore. <p>Kandidat je u roku od 20 minuta, uz upotrebu vizuelne prezentacije, izložio osnovnu ideju svojih istraživanja – uvod u problematiku, proučenu literaturu, kao i dosadašnja istraživanja u njegovoj oblasti, detaljno je pojasnio postavljene hipoteze i ciljeve, materijale i metode koje je planirao da koristi prilikom istraživanja i na kraju je obrazložio potencijalni naučni doprinos svojih polaznih istraživanja na argumentovan način. Diskusija u prisustvu komisije trajala je dodatnih 25 minuta, tako da je odbrana završena u 11:45 h. Svi članovi komisije su postavili pitanja, dali određene komentare na dosadašnje rezultate rada kandidata i sugestije na dalji razvoj i izradu disertacije. Komisija je konstatovala da se radi o opširnoj i jako zahtjevnoj temi, koja bi dala veliki</p>	

doprinos razvoju novih materijala koji bi u osnovi koristili atome bora i čiji bi rezultati bili od velikog značaja za dalja eksperimentalna ispitivanja i moguću primjenu u elektronici.

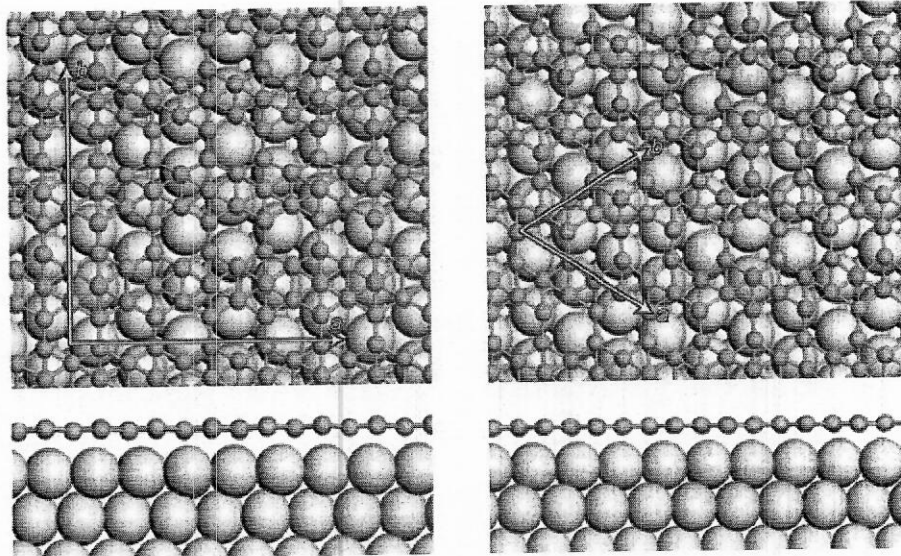
B. OCJENA PODOBNOSTI TEME DOKTORSKE DISERTACIJE

B1. Obrazloženje teme

Kada su dvojica naučnika, Gejm (Geim) i Novoselov (Novoselov), 2004. godine izdvojili iz grafita, parče grafena, tj. dvodimenzionalnu (2D) alotropsku modifikaciju atoma ugljenika, pokrenuta je lavina istraživanja materijala debljine jednog atoma. Kontrolisanje kako elektronskih tako i drugih fizičkih osobina na nanometarskom nivou predstavlja veliki izazov savremenih istraživanja u fizici čvrstog stanja. U odnosu na trodimenzionalne (3D) kristale, 2D kristali posjeduju širok spektar neobičnih fizičkih osobina, pa su zato interesantni i za ispitivanja koja su povezana sa modernim granama tehnologije. Međutim, ono što je jako interesantno je da 2D materijali mogu da posluže kao precizne alatke za testiranje fundamentalnih fizičkih modela magnetizma i superprovodljivosti, što je zapravo predmet istraživanja kandidata. Kako je često nemoguće eksperimentalno ispitati osobine 2D sistema na nano skali, koriste se različiti moderni numerički metodi koji omogućavaju da se različite strukture simuliraju i da se ispituju osobine istih. Magnetizam se može ispitivati primjenom teorije funkcionala gustine (eng. density functional theory; u daljem tekstu - DFT) u kombinaciji sa drugim teorijskim metodama, dok se superprovodljivost može ispitati koristeći perturbacionu teoriju funkcionala gustine, uz pomoć različitih teorijskih modela.

Kada je magnetizam 2D materijala u pitanju, posljednja ispitivanja sloja feromagnetnog izolatora CrI_3 , koji održava svoje dugodometno magnetno uređenje do 45 K, $FePS_3$, koji ispoljava Izingov (Ising) oblik antiferomagnetnog uređenja ili $Cr_2Ge_2Te_6$, koji se može opisati kao približno idealni 2D Hajzenbergov (Heisenberg) feromagnet, privukla su veliku pažnju naučne javnosti koja se bavi ispitivanjem magnetizma 2D uzoraka. Glavni cilj je da se istovremeno kreiraju strukture što manjih dimenzija, ali tako da posjeduju što je moguće veći kapacitet magnetnog memorisanja. Kako bi se informacije skladištile što je moguće gušće, neophodno je da najmanja struktura koja može da skladišti informacije, atom, posjeduje što veću vrijednost magnetnog momenta. Osim što 2D strukture posjeduju drugačije magnetne osobine u odnosu na 3D uzorke, često se prilikom kontrolisanja magnetnih osobina javljaju problemi. Jedan od načina da se pojave spinska polarizovana stanja u 2D kristalima je da kreiramo različite strukturne defekte ili da dopiramo strukture nekim magnetnim atomima. Dodavanje feromagnetnih metala na 2D kristale, pri čemu je neophodno da spijechimo njihovo grupisanje u veće klastere, npr. kreiranjem tačkastih strukturnih defekata, jedan je od mogućih načina da kreiramo 2D materijale sa primjesama u obliku jednoatomskih magneta. Međutim, iako metalni atomi u tačkastim defektima mogu da posjeduju nenultu vrijednost magnetnog momenta, ovaj tip defekata se u realnim uzorcima javlja proizvoljno po sloju, tako da dugodometno uređenje magnetnih momenata dodatih atoma postaje manje vjerovatno kao što je slučaj u grafenu i heksagonalnom bor nitridu. U prvom dijelu rada kandidata glavni akcenat je na sistemima kod kojih tokom sinteze dolazi do obrazovanja šupljina sa pravilnim rasporedom, na kojima je moguće adsorbovati metalne atome. Primjer materijala koji će kandidat razmatrati je borofen (2D struktura bora) koji će se koristiti kao podloga za adsorpciju gvožđa, čime bi se kreirao 2D feromagnet. Razlog za izbor borofena leži u činjenici da su prije nekoliko godina Feng i njegovi saradnici uspješno sintetizovali datu strukturu bora, tako što su atome bora naparavali na fcc(111) površinu srebra (slika 1). Atomi bora su karakteristični po tome što posjeduju mali kovalentni radijus i zato što mogu da učestvuju u procesu sp^2 hibridizacije, koja favorizuje formiranje 2D alotropa. Prethodno pomenuti borofen je primjer jedne takve strukture, pri čemu postoje dvije faze β_{12} i χ_3 (slika 1), u zavisnosti od prirodnog rasporeda šupljina, a iste su ekperimentalno dokazane upotrebom STM-a (eng. Scanning Tunnelling Microscopy). Slojevi

borofena su inertni na proces oksidacije i slabo interaguju sa suspodstratom srebra, a predmet istraživanja su obje faze borofena. Upotrebom istog supstrata su Manixs (Mannixs) i njegovi saradnici sintetisali druge polimorfe borofena, a kasnije je on kreiran i na Al(111), Au(111), Cu(111) i Ni(111). Takođe, dio istraživanja će se odnositi i na ispitivanje magnetnih osobina materijala sintetizovanih posljednjih godina.



Slika 1: Pogled odozgo (gornje slike) i sa strane (donje slike) β_{12} i χ_3 faze borofena na Ag(111).

Što se superprovodljivosti tiče, dimenzionalnost sistema može da ima veliki uticaj na same karakteristike materijala. Logičan zaključak bi bio da smanjivanjem dimenzionalnosti, fazni prelaz postaje teško ostvariv, zbog činjenice da manji broj čestica učestvuje u interakciji i da je kretanje konstituenata prostorno ograničeno. Međutim, eksperimentalna ispitivanja su dokazala upravo suprotnu činjenicu i potvrdila postojanje superprovodljivog stanja na 2D nivou. Interesantna su ispitivanja koja se odnose na praćenje promjene kritične temperature sa smanjivanjem dimenzionalnosti, jer se dugo smatralo da ona postaje niža, međutim kod materijala kao što su MoS_2 , $ZrNCl$ i $Bi2212$ je upravo dokazano suprotno. Takođe, zanimljivo je da neki 3D materijali, koji nijesu superprovodljivi, na 2D nivou postaju takvi. Za istraživanja kandidata su od velikog značaja posljednja teorijska ispitivanja koja su pokazala da kritična temperatura (temperatura faznog prelaza) za čistu β_{12} i χ_3 strukturu iznosi 18.7 K i 24.7 K, ali ukoliko se kao podloga koristi Ag(111), dodatna interakcija atoma bora i srebra dovodi do stabilizacije strukture, a samim tim i do smanjenja vrijednosti kritične temperature na 12.9 K i 21.6 K, za dvije strukture respektivno. Dodatna ispitivanja će se sprovesti za druge strukture bora i za različite podloge.

B2. Cilj i hipoteze

Prvi cilj ovog rada je da primjenom DFT metoda kandidat uspješno modeluje 2D magnet gvožđa na borofenu uz pomoć podloge srebra i potvrdi njegovu strukturnu stabilnost.

Hipoteza 1: atomi gvožđa će se jako vezati za šupljine borofena popunjavajući na taj način pravilan 2D obrazac šupljina duž sloja.

Hipoteza 2: atomi gvožđa će se adsorbovati iznad ili ispod šupljina u borofenu, tako se nalaze između bora i srebra, i na taj način interaguju sa obje površine.

Hipoteza 3: je da je u drugom pomenutom slučaju sistem stabilniji, jer uz interakciju sa borom, tada postoji i interakcija sa Ag(111). To ne isključuje mogućnost da je gvožđe iznad borofena metastabilno na nižim temperaturama i tek sa povećanjem temperature, atomi adsorbovanog gvožđa posjeduju dovoljno kinetičke energije da difunduju kroz šupljine u borofenu i da se adsorbuju između bora i Ag(111).

Hipoteza 4: da će atomi gvožđa formirati jednoatomske lance slijedeći strukturne osobine borofena. DFT će omogućiti da se odredi, upoređivanjem ukupnih energija struktura sa različitim orijentacijama magnetnih momenata na atomima gvožđa, najstabilnija magnetna konfiguracija datih lanaca, koji zbog međusobno malog rastojanja, nijesu izolovani jedan od drugog već čine 2D magnetnu strukturu.

DFT je u osnovi teorija osnovnog stanja elektronskog sistema, pa je za određivanje zavisnosti magnetnih osobina od temperature, što je drugi cilj rada, neophodno koristiti druge teorijske metode, kao što su npr. prosti modeli (Izingov ili Hajzenbergov) i Monte Karlo (Monte Carlo) simulacije.

Hipoteza 5: razmatrani 2D magnet je moguće modelovati primjenom Izingovog ili Hajzenbergovog modela, a izmjenjske konstante se mogu odrediti na osnovu razlika u energijama različitih spinskih konfiguracija, dobijenih primjenom DFT-a.

Hipoteza 6: kombinujući proste modele sa Monte Karlo proračunima moguće je odrediti kritičnu temperaturu faznog prelaza.

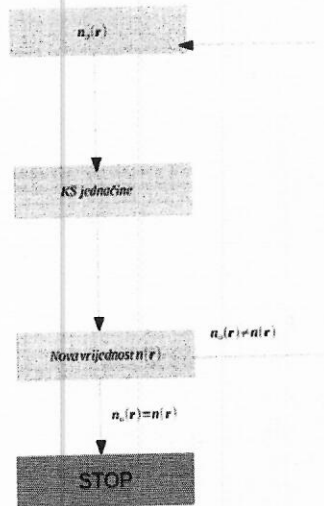
Osim magnetnih osobina, predmet istraživanja je i ispitivanje moguće pojave superprovodljivosti u određenim dopiranim 2D materijalima. Cilj je da se dopiranjem materijala pronade energetski najstabilnija struktura, kao i pojava superprovodljivosti usljed prisutne elektron-fonon interakcije, računajući odgovarajuću vrijednost kritične temperature T_C .

Hipoteza 7: uporednom analizom karakteristika čistog i dopiranog materijala moguće je ustanoviti koji su mehanizmi odgovorni za pojavu superprovodljivosti i na koji način dopiranje utiče na stabilnost strukture.

B3. Metodi i plan istraživanja

Istraživanja kandidata se najvećim dijelom oslanjaju na primjenu DFT metoda, čije će osnove biti prikazane u nastavku izvještaja. Naime, pomenuti metod služi za opisivanje osnovnog stanja sistema više jezgara i elektrona, a uvodeći adijabatsku aproksimaciju se sa složenih Šredingerovih (Schrödinger) jednačina interagujućeg sistema jezgara i elektrona prelazi na jednačine elektronskog podsistema u kojima koordinate jona služe kao parametri. DFT se snažno oslanja na dvije poznate Hoenberg-Konove (Hoenberg-Kohn) teoreme, prema kojima je glavna veličina energija kao funkcional elektronske gustine, koja omogućava da se iz višestičnog problema pređe u jednočestični problem, i preko koje je moguće odrediti energiju osnovnog stanja razmatranog sistema primjenom varijacionog postupka. Glavni nedostatak DFT metoda je nepoznavanje tačnog oblika funkcionala, međutim postoje brojne aproksimacije koje sa velikom tačnošću mogu da opišu sisteme koji se razmatraju.

U praksi se najčešće koristi Kon-Šamov (Kohn-Sham) pristup, koji omogućava da se sistem interagujućih elektrona zamijeni sistemom neinteragujućih elektrona odgovarajuće elektronske gustine, tako da se nepoznati dio interakcije elektrona opisuje izmjenjsko-korelacionim funkcionalom. Osim što se iz višestrukih jednačina prelazi na jednočestične jednačine, tzv. Kon-Šamove jednačine su numerički manje zahtjevne i rješavaju se samousaglašenim iterativnim postupkom, kako je to prikazano sa slici 2:



Slika 2: Shema Kon-Šamovog samousaglašenog iterativnog postupka.

Dakle, neophodno je definisati početnu vrijednost elektronske gustine $n_0(\vec{r})$ za koju se rješavaju Kon-Šamove (KŠ) jednačine iz kojih se dobijaju KŠ orbitale (jednočestične talasne funkcije) ψ_i .

Upotrebom dobijenih orbitala se može izračunati nova elektronska gustina: $n(\vec{r}) = \sum |\psi_i(\vec{r}, \sigma)|^2$, i postupak se zaustavlja onda kada razlike u početnoj i novodobijenoj elektronskoj gustini budu jako male. Za nepoznati dio, tj. za izmjenjsko-korelacioni funkcional se koristi aproksimacija lokalne gustine (eng. local density approximation) i uopštenog gradijentnog razvoja (eng. generalised gradient approximation).

DFT metod služi da odredimo osobine sistema na $T = 0$ K, pa je za ispitivanje uticaja temperature na magnetne osobine 2D kristala neophodno koristiti alternativne metode. Najčešće se koristi Monte Karlo (MK) metod, tj. numerički stohastički metod koji se zasniva na računanju raspodjela vjerovatnoća proizvoljnim izborom brojeva i ponavljanjem slučajnih pokušaja kako bi se u ovom slučaju odredile termodinamičke osobine sistema koji se razmatra, zadavanjem početnih parametara i jasno određenih ograničenja. Preduslov za upotrebu MK simulacija je da se 2D feromagnet gvožđa na borofenu može opisati Izingovim ili Hajzenbergovim modelom, tako da se dinamikom jednog spin „flipa“, koristeći Metropolis algoritam, sistem može razmatrati kao lanac Markova, a samim tim i odrediti kritična temperatura faznog prelaza iz paramagnetnog (neuređenog) u feromagnetno stanje (uređeno) stanje. Ulazni parametri, kao što su srednja vrijednost magnetnog momenta na atomima gvožđa i izmjenjske konstante interakcije, koji se koriste za MK proračune, se mogu odrediti iz prethodno urađenih DFT proračuna. Na taj način je moguće odrediti zavisnost susceptibilnosti, specifične toplote, energije i magnetizacije u zavisnosti od temperature.

Za ispitivanje superprovodljivosti se koristi perturbaciona teorija funkcionala gustine (DFPT) uz pomoć koje je moguće odrediti dinamiku kristalne rešetke (fonona) i ona podrazumijeva primjenu linearne perturbacione teorije u kombinaciji sa DFT teorijom. Da bi se opisala dinamika kristalne rešetke, glavni preduslov je precizno opisivanje elektronskog podsistema (uz pomoć DFT). Naime, kretanje elektrona uzrokuje blage oscilacije, u adijabatskoj aproksimaciji, jona oko ravnotežnog položaja tako da je neophodno da se ide i izvan adijabatske aproksimacije, razvojem u red ukupnog hamiltonijana i talasne funkcije sistema, kako bi se uzele u obzir moguće ekscitacije elektronskog podsistema usljed kretanja jona. Adijabatska aproksimacija, koja uzima u obzir samo dijagonalne elemente ukupnog hamiltonijana, sa velikom preciznošću može da opiše fononski spektar, tj. upotrebom Helman-Fajnmanove (Hellman-Feynman) teoreme i Furijeovih (Fourier) transformacija, moguće je odrediti dinamičku matricu (vibracioni spektar sistema). Ukoliko se ide izvan adijabatske aproksimacije, tj. ukoliko se razmatraju nedijagonalni elementi ukupnog hamiltonijana sistema, moguće je odrediti elektron-fonon matricne elemente, tj. određivanje vjerovatnoće emisije (apsorpcije) fonona usljed istovremenih ekscitacija u elektronskom podsistemu. Određene veličine koje se dobijaju su povezane sa Eliashbergovom (Eliashberg) spektralnom funkcijom, uz pomoć koje je moguće odrediti konstatu elektron-fonon sprege, a zatim je upotrebom Makmilanove (McMillan) formule lako doći do vrijednosti kritične temperature materijala. Za određivanje svih potrebnih veličina se koristi Kon-Šamova linearna perturbaciona shema, tako da se na kraju dobija skup samousaglašenih jednačina za perturbacioni sistem, koje su analogne Kon-Šamovim jednačinama u neperturbacionom slučaju (kao u DFT metodi).

Kandidat će se u prvom dijelu rada fokusirati na ispitivanje 2D magneta gvožđa na borofenu koristeći DFT metod. **Plan istraživanja** podrazumijeva:

- kreiranje strukture 2D bora na supstratu srebra (2DB/Ag(111)), određivanje njegove konstante kristalne rešetke i uporednu analizu rezultata sa eksperimentalnim STM rezultatima.
- Određivanje energije veze atoma bora na Ag(111) supstratu, kako bi se ispitala stabilnost borofena usljed transfera elektrona sa atoma srebra na atome bora. Bitno je naglasiti da su razlike u lokalnim elektronskim osobinama B atoma, usljed različitog broja susjeda, najčešće direktno povezane sa njihovom reaktivnošću, pa kada se razmatra isti hemijski element, atomi sa manjim brojem najbližih susjeda jače vežu adsorbate nego atomi sa većim brojem susjeda. Isti trend se očekuje i za Fe atome na 2DB/Ag(111).
- Određivanje najstabilnije geometrijski optimizovane strukture atoma gvožđa na 2DB/Ag(111). Očekuje se da je najstabilnija struktura, za jedan dodati Fe atom, da se on nalazi tačno iznad ili ispod centra šupljine.
- Određivanje energetske barijere za proces difuzije između ova dva stanja dodatog atoma gvožđa.
- Plan je da se zbog cjelokupne slike teorijski razmotri i izolovani borofen, kao i da se sprovede uporedna analiza adsorpcije atoma Fe na takvoj strukturi i na 2DB/Ag(111). Očekuje se da će energija veze Fe atoma na izolovanom sloju biti veća nego na 2DB/Ag(111), zbog drugačije reaktivnosti borofena usljed interakcije sa Ag(111) površinom.
- Da nakon ispitivanja adsorpcije jednog atoma gvožđa na borofenu, glavni akcenat bude na ispitivanju adsorpcione geometrije dva atoma gvožđa, zatim tri, kao i beskonačnog lanca atoma. Očekuje se proces dimerizacije atoma gvožđa u lancu usljed kompromisa suprotstavljenih efekata, sa jedne strane, velike reaktivnosti šupljina koja favorizuje

rastezanje lanaca, i sa druge Fe-Fe interakcije koja daje doprinos smanjenju rastojanja među atomima gvožđa.

- Ispitivanje spinske interakcije beskonačnih lanaca dimera, tj. određivanje energije različitih spinskih konfiguracija.
- Određivanje konstante izmjenjske interakcije iz DFT proračuna i srednje vrijednosti magnetnih momenata na atomima gvožđa.
- Računanje kritične temperature faznog prelaza upotrebom Monte Carlo metoda.

Dio istraživanja koji se odnosi na superprovodljivost podrazumijeva:

- kreiranje strukture, njenu geometrijsku optimizaciju, određivanje pogodnih vrijednosti k i q tačaka, kao i određivanje pogodnih parametara konvergencije.
- Određivanje zonske strukture, gustine stanja i grafika ukupne fononske gustine.
- Fonon i elektron-fonon proračuni - određivanje konstante sile i elektron-fonon koeficijenta, Furijeove transformacije, računanje dinamičke matrice, spektralne funkcije i fononskih frekvencija.
- Određivanje jačine elektron-fonon sprege duž odgovarajućih linija visoke simetrije, određivanje parametra elektron-fonon sprege λ i računanje kritične temperature T_C .
- Da se u kombinaciji sa drugim metodama dođe do konačnog opisa fenomena superprovodljivosti u datoj strukturi.

B4. Naučni doprinos

Brojna eksperimentalna ispitivanja razvoja 2D kristala bora na različitim supstratima zadnjih nekoliko godina su pokrenula, zbog svoje neobične strukture, pitanje mogućeg kreiranja vještačkih magneta na njima. Istraživanja kandidata predstavljaju pokušaj da se kreira struktura koja je stabilna i koja bi posjedovala kritičnu temperaturu faznog prelaza na znatno višim temperaturama od trenutno teorijski i eksperimentalno potvrđenih vrijednosti. Atom gvožđa koji se koristi, je klasičan predstavnik feromagnetne grupe atoma sa velikom vrijednošću magnetnog momenta, tako da ukoliko se adsorbuje na borofen čini 2D magnetnu strukturu (vještačku), a istraživanja kandidata bi otvorila i pitanje zamjene Fe atoma drugim magnetnim atomima. Ovakva struktura može da posluži kao dobra alatka za testiranje brojnih fizičkih modela, ali i za kreiranje komponente koja bi se koristila u nano-elektronici. Otkriće superprovodljivosti u borofenu otvara i pitanje moguće pojave ovog fenomena i u drugim materijalima koji se sastoje od atoma bora. Dopiranjem takvih struktura moguće je dati odgovor na pitanje koje strukture su stabilne, kako dopiranje utiče na mehanizme elektron-fonon sprege i kako na osnovu toga možemo da kontrolišemo vrijednost kritične temperature materijala. Istraživanja kandidata će biti od velike koristi za kreiranje superprovodljivih-nano uređaja, što je danas jedno od najaktuelnijih pitanja u ovoj oblasti.

B5. Finansijska i organizaciona izvodljivost istraživanja

Mr Božidar Šoškić je dobitnik stipendije za doktorska istraživanja Ministarstva nauke Crne Gore u trajanju od tri godine (2019.-2022. godine) koja će mu omogućiti kako finansijsku podršku tako i saradnju sa međunarodnim istraživačkim centrima. Prvi dio istraživanja, koji se odnosi na ispitivanje magnetnih osobina materijala, će biti sprovedena u saradnji sa Institutom za nuklearne nauke „Vinča” u Beogradu, Srbija, pod rukovodstvom njegovog komentora dr Željka Šljivančanina. Kroz ovu saradnju kandidat će imati pristup kompjuterskim resursima koji su tamo

dostupni, a osim toga biće uključen u različitim projektima, što će biti od velikog značaja za njegovo dalje istraživanje. Dugi dio istraživanja će se sprovesti pod nadzorom dr Milorada Miloševića, koji radi na Univerzitetu u Antverpenu, Belgija, koji je ujedno i rukovodilac grupe koja se bavi kompjuterskim simuliranjem i ispitivanjem superprovodljivih osobina 2D materijala. Ovaj boravak u Antverpenu je jako bitan, ne samo zbog kompjuterskih klastera koji posjeduje ovaj Univerzitet, već zato što će se napraviti važna veza prethodnih istraživanja koji se odnose na magnetizam, sa novim koji se tiču superprovodljivosti. Planirano je zatim da kandidat učestvuje na nekoj međunarodnoj konferenciji i da objavi nekoliko radova sa rezultatima koji su relevantni za časopise sa SCI liste.

Mišljenje i prijedlog komisije

Nakon usmenog izlaganja osnovne ideje istraživanja kandidata uz pomoć vizuelne prezentacije, kao i diskusije, tj. postavljanja pitanja i njegovih odgovora, komisija smatra da su istraživanja originalna, da posjeduju veliku naučnu vrijednost i da će dati veliki doprinos razvoju kako teorije tako i razvoju kreiranja novih materijala sa neobičnim i jako korisnim osobinama. Kandidat je tokom odbrane pokazao visok stepen poznavanja problematike kojom se bavi, kao i rezultatima koje je do sada postigao, što nas dodatno ohrabruje da će nastavak svojih istraživanja uspješno sprovesti do kraja. U prilog ovoj tvrdnji leži i činjenica da je dio rezultata u međuvremenu publikovan u značajnom časopsiu „Physical review materials“, što je samo dodatna potvrda inovativnosti i značaja istraživanja kojima se kandidat bavi. Na osnovu vrednovanja polaznih istraživanja komisija predlaže Vijeću Prirodno-matematičkog fakulteta i Senatu Univerziteta Crne Gore da se usvoji **pozitivan** izvještaj (ocjena) podobnosti doktorske disertacije kandidata.

Prijedlog izmjene naslova

Magnetizam i superprovodljivost u 2D kristalnim strukturama bora

Prijedlog promjene mentora i/ili imenovanje drugog mentora

Planirana odbrana doktorske disertacije

kraj 2022 godine

Izdvojeno mišljenje

(popuniti ukoliko neki član komisije ima izdvojeno mišljenje)

Ime i prezime

Napomena

ZAKLJUČAK

Predložena tema po svom sadržaju odgovara nivou doktorskih studija	DA
Tema je originalan naučno-istraživački rad koji odgovara međunarodnim kriterijumima kvaliteta disertacije	DA
Kandidat može na osnovu sopstvenog akademskog kvaliteta i stečenog znanja da uz adekvatno mentorsko vođenje realizuje postavljeni cilj i dokaže hipoteze	DA

Komisija za ocjenu podobnosti teme i kandidata

Prof. dr Predrag Miranović, redovni profesor Prirodno-matematičkog fakulteta Univerziteta Crne Gore, Crna Gora (mentor)

Miranović Predrag

Dr Željko Šljivančanin, naučni savjetnik Instituta za nuklearne nauke „Vinča” u Beogradu, Srbija (komentor)	<i>Marko Urošević</i>
Prof. dr Borko Vujičić, redovni profesor Prirodno-matematičkog fakulteta Univerziteta Crne Gore, Crna Gora (član komisije)	<i>Borko Vujičić</i>
Prof. dr Jovan Mirković, redovni profesor Prirodno-matematičkog fakulteta Univerziteta Crne Gore, Crna Gora (član komisije)	<i>Jovan Mirković</i>
Dr Zorica Popović, docent Fizičkog fakulteta Univerziteta u Beogradu, Srbija (član komisije)	<i>Zorica Popović</i>
U (navesti grad), (navesti datum)	za DEKANA <i>[Signature]</i>



PRILOG

PITANJA KOMISIJE ZA OCJENU PODOBNOSTI DOKTORSKE TEZE I KANDIDATA	
Prof. dr Predrag Miranović	<ol style="list-style-type: none"> 1. Da li se u proračunima za magnetizam i superprovodljivost razmatraju isti elektroni? 2. Da li će atomi gvožđa koji se nalaze iznad šupljine, ostati na tim položajima i sa povećanjem temperature (npr. do sobne temperature)? Da li se očekuje da sa porastom temperature, neki atomi siđu ispod šupljine, a neki da ostanu iznad? 3. Koji elektroni daju najveći doprinos magnetnim osobinama sistema i od kojih atoma je najveći doprinos pojavi magnetizma u sistemu?
Dr Željko Šljivančanin	<ol style="list-style-type: none"> 1. Na koji način kandidat planira da uzme u obzir efekte anizotropije u svojim sistemima, koje će opisati i Hajzenbergovim modelom, kako Mermin-Vagnerova teorema ne bi bila narušena? 2. Kakav je efekat anizotropije u 2D sistemima gvožđa i kobalta na drugim podlogama i kolike su vrijednosti kritičnih temperatura?
Prof. dr Borko Vujičić	<ol style="list-style-type: none"> 1. Da li je tačna tvrdnja da je uvijek superprovodljivost više favorizovana u 2D kristalima u odnosu na 3D kristale? 2. U proračunima za superprovodljive efekte, primjenom perturbacione teorije funkcionala gustine, kandidat planira da koristi Baronijev formalizam, koji podrazumijeva razmatranje valentnih elektrona. Na koji način je uzet u obzir i doprinos od provodljive zone?
Prof. dr Jovan Mirković	<ol style="list-style-type: none"> 1. Da li je superprovodljivost koja je predviđena teorijskim proračunima, upotrebom DFPT, u saglasnosti sa eksperimentalnim rezultatima? Kolika je preciznost? 2. Na koji način su gore navedene strukture sintetizovane i koji su najnoviji rezultati kada je u pitanju kreiranje strukture od 2D bora? 3. Kakav je uticaj hemijskih osobina na fizičke osobine sistema koje kandidat razmatra?
Dr Zorica Popović	<ol style="list-style-type: none"> 1. Da li je kandidat razmatrao i dodavanje drugih feromagnetnih atoma, konkretno kobalta (Co) i nikla (Ni)? 2. Zbog čega je gvožđe (Fe) prvi izbor kandidata?
PITANJA PUBLIKE DATA U PISANOJ FORMI	
ZNAČAJNI KOMENTARI	

