

**UNIVERZITET CRNE GORE
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
DOKTORSKE STUDIJE**

Crna Gora
UNIVERZITET CRNE GORE
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET

Broj 910
Podgorica, 17.05. 2021 god.

VIJEĆU PRIRODNO-MATEMATIČKOG FAKULTETA

Predmet: Prijava teme doktorske disertacije i predlog Komisije za ocjenu podobnosti teme

U skladu sa članom 33, stav 4, Pravila doktorskih studija, doktorand **mr Božidar Šoškić** je 07. 05. 2021. god. Vijeću Prirodno-matematičkog fakulteta podnio **Prijavu teme doktorske disertacije (PD Obrazac sa pratećom dokumentacijom)** pod naslovom **Magnetizam i superprovodljivost u 2D materijalima**.

Komisija za doktorske studije PMF-a je na elektronskoj sjednici održanoj 07. 05. 2021. god. razmatrala formalne uslove dostavljene prijave sa stanovišta neophodnih podataka i ispunjavanja uslova za prijavu teme i podnosi Vijeću

P R E D L O G

sastava **Komisije za ocjenu podobnosti teme:**

1. **Dr Borko Vujičić**, redovni profesor Prirodno-matematičkog fakulteta Univerziteta Crne Gore (naučna oblast: fizika čvrstog stanja)
2. **Dr Jovan Mirković**, redovni profesor Prirodno-matematičkog fakulteta Univerziteta Crne Gore (naučna oblast: fizika čvrstog stanja)
3. **Dr Predrag Miranović**, redovni profesor Prirodno-matematičkog fakulteta Univerziteta Crne Gore, mentor (naučna oblast: fizika čvrstog stanja)

Podgorica, 17. 05. 2021. god.

ZA KOMISIJU ZA DOKTORSKE STUDIJE

Doc. dr Goran Popivoda


PRIJAVA TEME DOKTORSKE DISERTACIJE

OPŠTI PODACI O DOKTORANDU	
Titula, ime i prezime	Mr Božidar Šoškić
Fakultet	Prirodno-matematički fakultet
Studijski program	Fizika
Broj indeksa	2/18
Ime i prezime roditelja	Nikola Šoškić
Datum i mjesto rođenja	26.02.1995, Einsiedeln, Švajcarska
Adresa prebivališta	Pešca bb, 84300 Berane, Crna Gora
Telefon	+38269549033
E-mail	bozidarsoskic95@gmail.com bozidarsoskic@edu.ucg.ac.me
BIOGRAFIJA I BIBLIOGRAFIJA	
Obrazovanje	Magistar fizike (MSc), Prirodno-matematički fakultet, 14.12.2018. godine, A (10.00) Specijalista fizike (Spec.Sci), Prirodno-matematički fakultet, 20.09.2017. godine, B (9.07) Bachelor fizike (BSc), Prirodno-matematički fakultet, 19.06.2016. godine, C (8.42)
Radno iskustvo	Novembar 2019. godine – stipendija Ministarstva nauke Crne Gore za doktorska istraživanja (2019. – 2022. godine) Novembar 2019. godine – član istraživačkog tima na Bilateralnom projektu za fiziku (Crna Gora - Srbija) Oktobar 2019. godine – saradnik na projektu PRACE-DECI 15 (SACandM) Januar 2019. godine – član COST programa u nanonauci Avgust 2018. godine - predavač na XI programu Ljetnje škole nauka; Istraživačka stanica „Lovćen“ Januar 2018. godine – stručno osposobljavanje u JU Gimnaziji „Panto Mališić“, u Beranama Maj 2017. godine - obuka na Institutu za nuklearne nauke „Vinča“, Beograd, Srbija Septembar 2015. godine - vodič na izložbi „CERN u Crnoj Gori – čudesni svijet čestica“, Ministarstvo nauke Crne Gore
Popis radova	Kandidat još uvijek nema publikovanih radova.
NASLOV PREDLOŽENE TEME	
Na službenom jeziku	Magnetizam i superprovodljivost u 2D materijalima
Na engleskom jeziku	Magnetism and superconductivity in 2D materials
Obrazloženje teme	

Posljednjih nekoliko godina dvodimenzionalni (2D) kristali su privukli veliku pažnju naučne javnosti jer su pogodni kandidati za proizvodnju materijala sa širokim spektrom neobičnih fizičkih osobina u odnosu na trodimenzionalne (3D) kristale. Naime, izolacijom jednog sloja grafena, 2D alotropske modifikacije ugljenika, 2004. godine [1], potvrđeno je postojanje 2D kristala, a to je bio i glavni razlog za pokretanje istraživanja njihovih fizičkih i hemijskih osobina [2,3], kao i razvoj različitih teorijskih modela kojima se iste pokušavaju na adekvatan način objasniti. Inspirisani jedinstvenim optičkim i elektronskim osobinama grafena, naučnici su otvorili i pitanje moguće primjene 2D materijala u modernim granama tehnologije, koje je brzo naišlo na pozitivan odziv. Takođe, ovi materijali služe kao precizne alatke za testiranje fundamentalnih fizičkih modela magnetizma i superprovodljivosti u 2D limitu, što je zapravo i predmet naših istraživanja. Magnetizam želimo da ispitamo primjenom teorije funkcionala gustine (eng. density functional theory; u daljem tekstu - DFT) u kombinaciji sa drugim teorijskim modelima, dok superprovodljivost želimo da ispitamo koristeći perturbacionu teoriju funkcionala gustine, čija je upotreba u smislu primjene za izučavanje superprovodljivih efekata ograničena, kao i upotrebom drugih teorijskih modela.

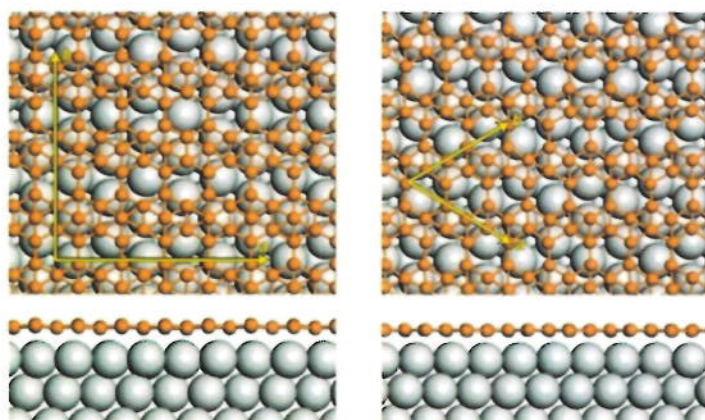
Istraživanje magnetizma u 2D materijalima je privuklo veliku pažnju naučne javnosti zbog činjenice da, prema posljednjim studijama, sloj feromagnetnog izolatora CrI_3 održava svoje magnetno uređenje do 45 K [4], FePS_3 sloj ispoljava Izingov (Ising) oblik antiiferomagnetnog uređenja [5], dok se npr. jednosloj $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ može opisati kao približno idealni 2D Hajzenbergov (Heisenberg) feromagnet [6]. U grafenu, heksagonalnom bor nitridu (h-BN) i drugim poznatim 2D materijalima, kreiranje strukturnih defekata i/ili dopiranje sa magnetnim atomima predstavlja najjednostavniji način za uspostavljanje magnetizma. Proračuni uz pomoć teorije funkcionala gustine potvrdili su pojavu spinski polarizovanih stanja u jednoatomskim šupljinama grafena [7], a kasniji eksperimenti su demonstrirali paramagnetnu prirodu grafena sa defektima [8]. Međutim, metalni atomi koji se adsorbuju na grafenu ili h-BN-u teže da se grupišu u klastere [9] što otežava kontrolisanje veličine i elektronskih osobina deponovanih metalnih nanostrukture. Sa druge strane, ukoliko se isti atomi adsorbuju na tačkastim defektima grafena ili h-BN-a, oni postaju kinetički stabilne strukture [10] i jednoatomske šupljine se ponašaju kao „treping“ (eng. trapping) centri koji sprečavaju njihovo dalje grupisanje. Iako metalni atomi, u tačkastim defektima, mogu da posjeduju nenulti magnetni moment, ovi defekti su u realnim uzorcima proizvoljno raspoređeni po sloju grafena i h-BN-a, što dugodometno uređenje magnetnih momenata dodatih atoma u tim sistemima čini malo vjerovatnim. U prvom dijelu rada će glavni akcenat biti na sistemima kod kojih tokom sinteze dolazi do obrazovanja šupljina sa pravilnim rasporedom, jer se na njima mogu adsorbovati metalni atomi. Primjer takvog 2D materijala je borofen i prva struktura koja će da bude predmet naših istraživanja je vještački 2D magnet nastao adsorpcijom gvožđa na borofenu. Za naše dalje istraživanje je interesantna i činjenica da su prethodna DFT ispitivanja predviđela pojavu borofena sa većim šupljinama [11], a što je veoma bitno, i pojavu superprovodljivosti [12,13] u kombinaciji sa drugim metodama, što ukazuje na visok nivo tačnosti DFT-a u opisu fizičkih osobina novih materijala.

Kada generalno govorimo o superprovodljivosti, formiranje Kuperovih (Cooper) parova dovodi do superprovodljivog stanja, a kako postoji fazni prelaz iz uređenog u neuređeni sistem, smanjivanje dimenzionalnosti sistema može da ima veliki uticaj na njegove karakteristike. Naizgled, zbog niske dimenzionalnosti sistema logičan zaključak bi bio da je fazni prelaz teško ostvariv, ne samo zbog činjenice da je interakcija između elektrona prostorno ograničena, već i zbog manjeg broja čestica koje mogu da učestvuju u samoj interakciji. Poboľšanjem tehnologije proizvodnje jako uređenih kristalnih struktura na nano skali omogućen je bolji uvid u osobine 2D materijala. Nakon dugogodišnjih istraživanja sa sigurnošću se može tvrditi da je superprovodljivost u 2D

materijalima moguća, i ne samo to, ona je u potpunosti favorizovana. U tom duhu je bitno posmatrati i promjenu kritične temperature sa smanjivanjem dimenzionalnosti, jer se dugo vjerovalo da ona postaje niža smanjivanjem dimenzionalnosti, a otkrićem materijala kao što su MoS_2 , $ZrNCl$ i $Bi2212$ je upravo dokazano suprotno. Zanimljivo je i da neki 3D materijali, koji nijesu superprovodljivi, na 2D nivou postaju takvi, kao npr. $KTaO_3$ [14]. Upotrebom kompjuterskih simulacija moguće je bolje ispitivanje i vještačkih struktura, a što je bitnije, brojne fizičke osobine takvih materijala se mogu objasniti već postojećim teorijskim metodama. Na taj način je moguće steći bolju sliku o superprovodljivosti u niskodimenzionalnim sistemima i nastaviti za traganjem novih, čije bi otkriće doprinijelo daljem razvijanje teorija o superprovodljivosti.

Pregled istraživanja

Teorija funkcionala gustine (DFT) predstavlja kvantno-mehanički metod koji je u mogućnosti da precizno opiše strukturne i elektronske osobine velikog broja kristala, molekula i amorfnih tijela. Ova teorija omogućava da se Šredingerova (Schrödinger) jednačina za višestručni sistem zamijeni jednočestičnim svojstvenim problemom u kome se elektron-elektron interakcija opisuje u aproksimaciji srednjeg polja. Metod je jako pogodan za određivanje najstabilnije geometrije sistema, energije adsorpcije atoma na različitim površinama, magnetnih osobina sistema, elektronske strukture materijala i slično. DFT će se, u prvom dijelu rada, koristiti za ispitivanje strukturnih i magnetnih osobina feromagnetnog 2D gvožđa na borofenu. Razlog za izbor borofena je otkriće od prije nekoliko godina, kada su Feng i njegovi saradnici uspješno sintetizovali 2D strukturu bora – borofen – tako što su bor naparavali na fcc(111) površini srebra [15] (slika 1).



Slika 1: Pogled odozgo (gornje slike) i sa strane (donje slike) β_{12} i χ_3 faze borofena na Ag(111) [16].

Atomi bora posjeduju mali kovalentni radijus i zato mogu da učestvuju u procesu sp^2 hibridizacije koja favorizuje formiranje 2D alotropa. Gore navedeni borofen je primjer jedne takve strukture, pri čemu postoje dvije faze borofena, β_{12} i χ_3 (slika 1), u zavisnosti od prirodnog rasporeda šupljina, a iste su eksperimentalno dokazane upotrebom STM-a (eng. Scanning Tunnelling Microscopy). Gore navedeni slojevi borofena su inertni na proces oksidacije i slabo interaguju sa supstratom srebra, a u našem radu ćemo ispitivati obje faze. Takođe, izračunate elektronske osobine pokazuju da borofen posjeduje metalni karakter. Interesantno je da su upotrebom istog supstrata srebra Manix (Mannix) i njegovi saradnici sintetisali druge polimorfe borofena i izučavali njihove strukturne i elektronske osobine [17]. DFT rezultati, koji su pratili ova istraživanja, su bili

u odličnoj saglasnosti sa eksperimentom [18] i potvrdili su postojanje stabilnog 2D kristala bora [19]. Borofen je kasnije sintetisan i na Al(111) [20], Au(111) [21], Cu(111) [22] i Ni(111) [18] supstratu. Osim istraživanja magnetnih osobina materijala nastalog deponovanjem gvožđa na borofenu dio naših istraživanja će se odnositi i na ispitivanje magnetnih osobina nekoliko 2D materijala sintetizovanih posljednjih godina. Pogodni kandidati su CrI₃, Cr₂Ge₂Te₆, Fe₃GeTe₂, T-VSe₂, T-CrTe₂, FePS₃, MnPS₃, CrCl₃ i MnBi₂Te₄. Takođe, ispitivaćemo i superprovodljivost različitih heterostuktura borofena i drugih 2D materijala, kao i superprovodljivost u dopiranom borofenu.

Kada je u pitanju superprovodljivost, njena prva mikroskopska teorija, koja se oslanja na formalizam sparivanja elektrona, uspostavljena je 1957. godine od strane Bardina (Bardeen), Kupera (Cooper) i Šrifera (Schrieffer) - BCS teorija - i snažno podržava mehanizam elektron-fonon sprege. Za klasične (konvencionalne) superprovodnike, kod kojih je dominantan mehanizam slabog sparivanja, BCS teorija daje dobar opis fenomena superprovodljivosti u brojnim materijalima. Međutim, 60-tih godina se javljaju sve veće razlike između eksperimentalnih i teorijskih rezultata, što je upućivalo na neadekvatnost teorije u opisivanju superprovodnika kod kojih je dominantna jaka elektron-fonon interakcija. Data teorija, u prvom redu, ne obuhvata cjelokupnu fiziku elektron-fonon sprege, pa je predviđanje kritične temperature i superprovodljivog procjepa postalo problematično za veliki broj materijala, a možemo slobodno reći da je to i danas jedan od glavnih problema moderne teorije kondenzovanog stanja. Međutim, uključujući metod Grinovih (Green) funkcija, Migdal-Eliašbergov (Migdal-Eliashberg) formalizam pruža veoma precizan opis superprovodljivog stanja u skoro svim superprovodnicima. U Eliašbergovoj teoriji, elektron-fonon sprega je lokalna u prostoru i „retardovana“ u vremenu, uzimajući na taj način u obzir i vrijeme koje je potrebno za odvijanje procesa elektron-fonon-elektron rasijanja, za razliku od BCS modela prema kojem se rasijanje odvija trenutno. Eliašbergove jednačine, koje se rješavaju samousaglašeno, daju sopstvenu energiju elektrona na Fermi nivou. Ravnotežne superprovodljive osobine, bilo kojeg materijala, se mogu odrediti poznavajući spektralnu funkciju α^2F , gdje je α srednja elektron-fonon interakcija, a F fononska gustina stanja. Navedena funkcija mjeri doprinos fonona sa frekvencijom ω procesima rasijanja elektrona na Fermijevoj površini i povezana je sa bezdimenzionim parametrom elektron-fonon sprege λ . Koristeći Eliašbergovu teoriju moguće je odrediti vrijednost superprovodljivog procjepa, kao i kritične temperature nekog superprovodljivog materijala preko Makmilanove (McMillan) formule. Sistem jednačina koje numerički rješavamo imaju isti oblik kao jednačine u DFT teoriji, a metod koji se koristi je metod perturbacione teorije funkcionala gustine (DFPT). Za naše ispitivanje zanimljivo je i otkriće da je konstanta elektron-fonon sprege u čistoj β_{12} i χ_3 strukturi bora značajno veća u odnosu na vrijednost koja je dobijena npr. za MgB_2 . Kritična temperatura za ove dvije faze 2D bora iznosi 18.7 K i 24.7 K što je značajno više od teorijski predviđene i eksperimentalno dobijene vrijednosti za grafen. Ukoliko se Ag(111) koristi kao podloga, interakcija atoma bora i srebra dovodi do stabilizacije strukture, a vrijednost kritične temperature se smanjuje i iznosi 12.9 K i 21.6 K za β_{12} i χ_3 respektivno [13]. Jedan od mogućih načina da se poveća vrijednost kritične temperature, u odnosu na prethodno navedene vrijednosti, je upotrebom drugih podloga.

Cilj i hipoteze

Prvi cilj ovog rada je da primjenom DFT-a sprovedemo kompjutersko modelovanje 2D magneta gvožđa na borofenu pri čemu će se kao podloga koristiti Ag(111) i da potvrdimo njegovu strukturnu stabilnost.

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

Hipoteza 2: atomi gvožđa se mogu adsorbovati iznad šupljina u borofenu ili ispod njih, tako da budu smješteni između bora i srebra i da interaguju sa obje površine.

Hipoteza 3: u drugom slučaju će sistem biti stabilniji jer uz interakciju sa borom, tada postoji i interakcija sa Ag(111). Ali 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: slijedeći strukturne osobine borofena, očekujemo da će atomi gvožđa formirati jednoatomske lance. DFT će nam omogućiti da poređenjem ukupnih energija struktura sa različitim orijentacijama magnetnih momenata na atomima gvožđa odredimo najstabilniju magnetnu konfiguraciju ovih lanaca koji, zbog malog međusobnog rastojanja, nisu izolovani jedan od drugog već čine 2D magnetnu strukturu.

Pošto je DFT u osnovi teorija osnovnog stanja elektronskog sistema, za određivanje zavisnosti magnetnih osobina od temperature, što je drugi cilj našeg rada, su nam neophodni drugačiji teorijski metodi, kao što su npr. prosti modeli (Izingov i Hajzenbergov) i Monte Karlo (Monte Carlo) simulacije.

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

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

Osim magnetnih osobina, predmet našeg interesovanja je i ispitivanje moguće pojave superprovodljivosti u određenim dopiranim 2D materijalima. Cilj je da dopiranjem materijala tražimo energetski najstabilniju strukturu, kao i pojavu superprovodljivosti usljed prisutne elektron-fonon interakcije, računajući odgovarajuću vrijednost kritične temperature T_C .

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

Materijali, metode i plan istraživanja

Materijali

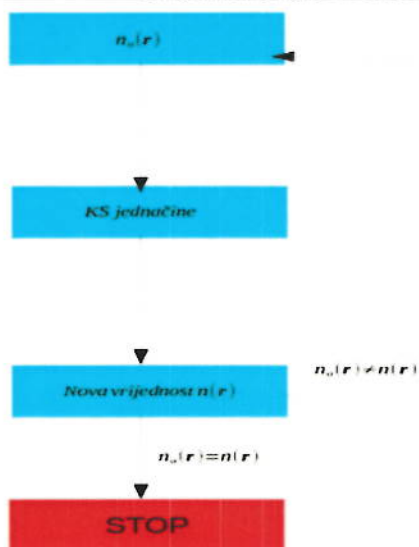
U radu će se koristiti softverski paketi ASE (eng. Atomic Simulation Environment) [23,24] i Quantum ESPRESSO [25,26], koji su napisani u programskim jezicima pajton (eng. Python) i fortran. ASE omogućava jednostavnu konstrukciju komplikovanih nanostrukture željenih osobina i analizu rezultata dobijenih primjenom kompjuterskih programa zasnovanih na DFT-u. Jedan od njih je Quantum ESPRESSO i on omogućava da se vrše tačni proračuni strukturnih i elektronskih osobina različitih kompleksnih sistema. Zbog zahtjevnih numeričkih proračuna, neophodno je

korišćenje superkompjutera, što će biti obezbijedeno kroz saradnju sa Institutom za nuklearne nauke „Vinča“ u Beogradu, Univerzitetom u Antverpenu, a određeni kompjuterski resursi su dostupni i na Univerzitetu Crne Gore.

Metodi

Prvo ćemo izložiti osnove metoda DFT-a, kojim se opisuju elektronska svojstva osnovnog stanja fizičkih sistema elektrona i jezgara. Polazeći od Šredingerove jednačine sistema interagujućih elektrona i jezgara, uvodeći adijabatsku aproksimaciju, problem se svodi na rješavanje Šredingerove jednačine elektronskog sistema u kojoj jonski stepeni slobode figurišu kao parametri. DFT počiva na Hoenberg-Konovim (Hoenberg-Kohn) teoremama koje pokazuju da je energija osnovnog stanja jedinstveni funkcional elektronske gustine i koji nam omogućava da višestruki problem svedemo na jednočestični, a varijacionim postupkom, tj. minimizacijom datog funkcionala možemo da odredimo osnovno stanje fizičkog sistema i njegove fizičke osobine. Nažalost, tačan oblik funkcionala je nepoznat i u praksi se pribjegava aproksimacijama u opisu interakcije elektrona, sa naglaskom na što tačnijem opisu kinetičke energije elektronskog gasa i klasične elektrostatičke interakcije, kao dominantnih veličina. Primjenom Kon-Šamovog (Kohn-Sham) pristupa („anzaca“) se sistem interagujućih elektrona zamjenjuje fiktivnim sistemom neinteragujućih elektrona, iste elektronske gustine, a nepoznati dio interakcije elektrona se približno opisuje tzv. izmjensko-korelacionim funkcionalom. Na ovaj način se ostvaruje prelaz iz višestrukih Šredingerovih jednačina u numerički manje zahtjevne jednočestične jednačine. Za rješavanje dobijenih jednočestičnih jednačina, poznatih kao Kon-Šamove (KŠ) jednačine, se koristi samousaglašeni iterativni postupak koji podrazumijeva:

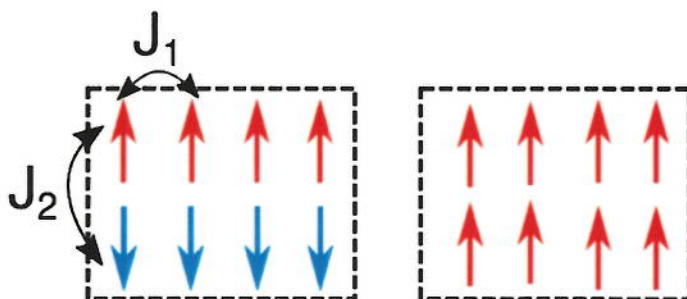
1. definisanje početne elektronske gustine osnovnog stanja $n(\vec{r})$;
2. Za početnu vrijednost elektronske gustine rješavamo KŠ jednačine kako bismo odredili KŠ jednočestične talasne funkcije (orbitale) ψ_i ;
3. Izračunavamo elektronsku gustinu osnovnog stanja, koristeći relaciju: $n(\vec{r}) = \sum |\psi_i(\vec{r}, \sigma)|^2$;
4. Upoređujemo novodobijenu elektronsku gustinu osnovnog stanja sa prethodnom i ukoliko se vrijednosti elektronske gustine u dvije iteracije razlikuju manje od zadate tačnosti, onda smo uspješno odredili tačnu vrijednost elektronske gustine osnovnog stanja i iteracioni postupak je tada završen (slika 2).



Slika 2: Shematski prikaz KŠ samousaglašenog iterativnog postupka

Što se opisa izmjenjsko-korelacione interakcije tiče, koji predstavlja glavno ograničenje u pogledu tačnosti ovog pristupa, najčešće se primjenjuju dvije aproksimacije: aproksimacija lokalne gustine (eng. local density approximation) i aproksimacija uopštenog gradijentnog razvoja (eng. generalised gradient approximation).

Kako je DFT zapravo teorija osnovnog stanja elektronskog sistema, pri razmatranju uticaja temperature na magnetizam 2D materijala, što je takođe predmet našeg istraživanja, neophodno je kombinovati DFT sa drugim teorijskim metodama. Jedan od najčešće korišćenih je Monte Karlo metod. Riječ je o metodi statističkog ispitivanja, tj. o numeričkoj stohastičkoj metodi koja se zasniva na računanju raspodjela vjerovatnoća proizvoljnim izborom brojeva i ponavljanjem slučajnih pokušaja kako bi se, u našem slučaju, odredile termodinamičke osobine različitih sistema koje nijesu unaprijed poznate, zadavanjem početnih parametara i određenih ograničenja. Pri primjeni Monte Karlo (MK) simulacija, pretpostavićemo da naš sistem možemo da opišemo Izingovim ili Hajzenbergovim modelom, a odgovarajuće parametre izmjenjske interakcije koje bi koristili za MK simulacije bi odredili iz prethodno urađenih DFT proračuna.



Slika 3: Jedinične ćelije dvije spinske konfiguracije, antiferomagnetne i feromagnetne interakcije, respektivno.

Jedan od načina njihovog određivanja je da razlike u energijama različitih spinskih konfiguracija dobijenih primjenom DFT-a predstavimo Izingovim modelom, a izmjenjske konstante budu parametri koje fitujemo. Na slici 3 je prikazana jedinična ćelija, koja ovdje služi samo kao ilustracija, gdje je npr. J_1 definisano kao konstanta izmjenjske interakcije između dva susjedna atoma istog lanca, a J_2 kao interakcija najbližih susjeda u različitim lancima. Izračunate vrijednosti za konstante izmjenjske interakcije možemo da iskoristimo za MK proračune.

Za navedene MK proračune ćemo koristiti Metropolis algoritam, koji podrazumijeva:

1. pripremanje inicijalne konfiguracije N spinova;
2. Prevrtanje spina na proizvoljno izabranoj tački rešetke;
3. Računanje promjene energije;
4. Ukoliko je promjena manja od nule, onda se ona kao takva prihvata. U suprotnom, promjena se prihvata sa vjerovatnoćom $\exp\left(\frac{-dE}{T}\right)$, tako da zadovoljavamo uslove balansa i postizanja krajnjeg ravnotežnog stanja;
5. Postupak se ponavlja izabrani broj puta.

Na ovaj način MK metod koristimo za simuliranje određenih fizičkih osobina sistema, kao što je spontana magnetizacija, specifična toplota, susceptibilnost i ukupna energija. U brojnim ranijim ispitivanjima različitih 2D struktura kritična temperatura određena Izingovim modelom je značajno precijenjena, pa se češće koristi Hajzenbergov model, koji magnetne momente razmatra kao klasične 3D vektore, tako da ćemo zbog cjelokupne analize najvjerovatnije upotrijebiti oba modela. Određivanje kritične temperature biće sprovedeno uz pomoć metoda koji prati promjene veličina koje mjerimo sa odabirom različitih veličina ćelije L (eng. method of finite-size lattice scaling) [27].

Drugi dio rada, koji se odnosi na superprovodljivost, podrazumijeva upotrebu metoda perturbacione teorije funkcionala gustine (DFPT) za računanje dinamike rešetke i uključuje primjenu linearne perturbacione teorije u kombinaciji sa DFT. Najčešće se koristi Baroni (Baroni) formalizam koji obuhvata skup samousaglašenih jednačina koje se rješavaju pomoću metoda Grinovih funkcija. Razmatrajući dinamiku rešetke, vibracije jezgra se tumače klasično, a jednačine kretanja su spregnute diferencijalne jednačine čija rješenja predstavljaju pomjeraje jezgra usljed perturbacije. Dalje se vrši razvoj u red člana sile oko ravnotežnog položaja jezgra, gdje su koeficijenti većeg reda razvoja, perturbacioni članovi. U kristalima, atomski pomjeraji zadovoljavaju Blohovu (Bloch) teoremu, tako da se klasične jednačine kretanja mogu razdvojiti i izraziti preko talasnog broja $\vec{q}$. Rješenja rezultujuće sopstvene jednačine su frekvencije pojedinačne perturbacije ω_q . Koristeći DFPT proračune, dobija se skup izvoda koji formira dinamičku matricu, koja se može dijagonalizovati tako da daje sopstvene frekvencije i sopstvene mode fonona. Da bi se DFPT koristio za različite materijale, polazi se od Born-Openhajmerove (Born-Oppenheimer) aproksimacije, tako da se osnovno stanje i ukupna energija mogu izračunati kao funkcija tih perturbacija. U praksi je to energija osnovnog stanja sistema interagujućih elektrona koji se kreću u polju slabo pokretnih jezgara (ABO aproksimacija). Da bi se izračunale vibracione osobine i ravnotežna geometrija sistema, koristi se Helman-Fajnmanova (Hellman-Feynman) teorema. Na kraju postupka se dobija skup samousaglašenih jednačina za perturbacioni sistem koje su analogne Kon-Samovim jednačinama u neperturbovanom sistemu. Na taj način je moguće izračunati frekvencije fonona i energije, kao i opisivanje elektron-fonon interakcije. Eliášbergova spektralna

funkcija se može izraziti kao suma doprinosa od procesa rasijanja koja povezuje elektrone sa fononima na Fermi površini. Tako dobijamo parametre elektron-fonon sprege, a samim tim i kritične temperature materijala upotrebom Makmilanove formule.

Plan istraživanja

U prvom dijelu rada ćemo se fokusirati na ispitivanje 2D magneta gvožđa na borofenu (β_{12}), (slika 1) upotrebom DFT metoda. Prvi dio proračuna 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) supstrat, kako bi ispitali 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 razmatramo isti hemijski element atomi sa manjim brojem najbližih susjeda jače vežu adsorbate nego atomi sa većim brojem susjeda. Isti trend očekujemo da vidimo za Fe atome na 2DB/Ag(111);
- Određivanje najstabilnije geometrijski optimizovane strukture atoma gvožđa na 2DB/Ag(111). Očekujemo da je najstabilnija struktura, za jedan dodati Fe atom, tačno iznad ili ispod centra šupljine;
- Određivanje energetske barijere za proces difuzije između ova dva stanja dodatog atoma gvožđa;
- Da zbog cjelokupne slike teorijski razmotrimo i izolovani borofen, kao i da sprovedemo uporednu analizu adsorpcije atoma Fe na takvoj strukturi i na 2DB/Ag(111). Očekujemo 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. Očekujemo 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 Karlo metoda.

Ista ispitivanja ćemo sprovesti i za χ_3 fazu 2D bora (slika 1). Nakon ovog ispitivanja, uradićemo i dio koji se odnosi na ispitivanje magnetnih osobina nekog već sintetizovanog 2D materijala.

Drugi 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 (Fourier) transformacije, računanje dinamičke matrice, spektralne funkcije i fononskih frekvencija;
- Određivanje jačine elektron-fonon sprege duž odgovarajućih linija visoke simetrije, određivanje parametra λ i računanje kritične temperature T_C ;
- Da u kombinaciji sa drugim metodama dođemo do konačnog opisa fenomena superprovodljivosti u datoj strukturi.

Očekivani naučni doprinos

Eksperimentalna ispitivanja razvoja 2D struktura bora na različitim supstratima posljednjih godina su otvorila i pitanje mogućnosti kreiranja vještačkih magnetnih struktura na njima. Istraživanja koja ćemo da sprovedemo upotrebom DFT metoda, u prvom planu, kao i upotrebom drugih teorijskih metoda predstavljaju pokušaj da se doprinese razvoju novih vještačkih struktura, koji bi posjedovali veliku strukturnu stabilnost i kritične tačke faznog prelaza na znatno višim temperaturama od postojećih. U našim istraživanjima korist ćemo atome gvožđa, karakteristične predstavnike grupe feromagnetnih atoma, kako bi kreirali feromagnetni 2D magnet na 2DB/Ag(111) i ispitali osobine istog, a nadamo se da ćemo našim istraživanjima doći do rezultata koji mogu da otvore i pitanje zamjene Fe atoma nekim drugim metalnim atomima koji posjeduju nenulti magnetni moment. Zajedno sa sintetizovanim materijalima, ove strukture mogu da posluže kao dobre alatke za testiranje fundamentalnih teorijskih modela, ali isto tako i za eventualnu primjenu u elektronici. Takođe, otkrićem superprovodljivosti u β_{12} i χ_3 2D boru, otvara se novi put za dalje ispitivanje fenomena superprovodljivosti u materijalima koji u osnovi koriste atome bora. Naime, njihovim dopiranjem želimo objasniti kakva je stabilnost sistema, kolika je promjena konstante elektron-fonon sprege λ , kako je moguće da podešavamo i kontrolišemo datu konstantu i kakav to uticaj ima na njihove vrijednosti kritičnih temperatura T_C . Očekujemo da će data istraživanja biti i od velike koristi za dalji razvoj superprovodljivih-nano uređaja, kao i za naučni razvoj teorije o 2D materijalima.

Spisak objavljenih radova kandidata

Kandidat još uvijek nema publikovanih radova.

Popis literature

1. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, A. A. Firsov, *Nature* **438**, 197 (2005).
2. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
3. A. K. Geim and K. S. Novoselov, *Nat. Mater* **6**, 183 (2007).
4. B. Huang, G. Clark, E. Navarro-Moratalla, D. R. Klein, R. Cheng, K. L. Seyler, D. Zhong, E. Schmidgall, M. A. McGuire, D. H. Cobden et al., *Nature* **546**, 270 (2017).
5. J.-U. Lee, S. Lee, J. H. Ryoo, S. Kang, T. Y. Kim, P. Kim, C.-H. Park, J.-G. Park, H. Cheong, *Nano Lett.* **16**, 7433 (2016).
6. C. Gong, L. Li, Z. Li, H. Ji, A. Stern, Y. Xia, T. Cao, W. Bao, C. Wang, Y. Wang et al., *Nature* **546**, 265 (2017).
7. O. V. Yazyev, L. Helm, *Phys. Rev. B* **75**, 125408 (2007).
8. R. R. Nair, M. Sepioni, I-Ling Tsai, O. Lehtinen, J. Keinonen, A. V. Krashenninnikov, T. Thomson, A. K. Geim, I. V. Grigorieva, *Nature Phys.* **8**, 199 (2012).
9. S. Stavrić, M. Belić, Ž. Šljivančanin, *Carbon* **96**, 216 (2016).

10. D. N. Sredojević, M. R. Belić, Ž. Šljivančanin, J. Phys. Chem. C **124**, 6860 (2020).
11. Y. Wang, Y. Park, L. Qiu, I. Mitchell, F. Ding, J. Phys. Chem. Lett. **11**, 6235 (2020).
12. M. Gao, Q.-Z. Li, X.-W. Yan, J. Wang, Phys. Rev. B **95**, 024505 (2017).
13. Shaoxiang Sheng, Jiang-Bin Wu, Xin Cong, Qing Zhong, Wenbin Li, Wengi Hu, Jian Gou, Peng Cheng, Ping-Heng Tan, Lan Chen, and Kehui Wu, ACS Nano **13**, 4133-4139 (2019).
14. Ueno K. *et al.*, Nat. Nanotechnol. **6**, 408-412, (2011).
15. B. J. Feng, J. Zhang, R. Y. Liu, T. Iimori, C. Lian, H. Li, L. Chen, K. H. Wu, S. Meng, F. Komori *et al.*, Phys. Rev. B **94**, 041408(R) (2016).
16. T. Kondoa, Science and Technology of Advanced Materials **18**, 780-804, (2017)
17. A. J. Mannix, X. F. Zhou, B. Kiraly, J. D. Wood, D. Alducin, B. D. Myers, X. L. Liu, B. L. Fisher, U. Santiago, J. R. Guest *et al.*, Science **350**, 1513 (2015).
18. Z. H. Zhang, Y. Yang, G. Y. Gao, B. I. Yakobson, Angew. Chem. Int. Ed. **54**, 13022 (2015).
19. Z. Zhang, A. J. Mannix, X. L. Liu, Z. Hu, N. P. Guisinger, M. C. Hersam, B. Y. Yakobson, Sci. Adv. **5**, eaax0246 (2019).
20. W. B. Li, L. J. Kong, C. Y. Chen, J. Gou, S. X. Sheng, W. F. Zhang, H. Li, L. Chen, P. Cheng, K. H. Wu, Sci. Bull. **63**, 282 (2018).
21. B. Kiraly, X. L. Liu, L. Q. Wang, Z. H. Zhang, A. J. Mannix, B. L. Fisher, B. I. Yakobson, M. C. Hersam, N. P. Guisinger, ACS Nano **13**, 3816 (2019).
22. R. T. Wu, I. K. Drozdov, S. Eltinge, P. Zahl, S. Ismail-Beigi, I. Božović, A. Gozar, Nature Nanotech. **14**, 44 (2019).
23. S. R. Bahn, K. W. Jacobsen, Comput. Sci. Eng. **4**, 56 (2002).
24. A. H. Larsen, J. J. Mortensen, J. Blomqvist, I. E. Castelli, R. Christensen, M. Du lak, J. Friis, M. N. Groves, B. Hammer, C. Hargus *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **29**, 273002 (2017).
25. P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G. L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 395502 (2009).
26. P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme, O. Bunau, M. B. Nardelli, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, M. Cococcioni *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **29**, 465901 (2017).
27. K. Binder, Rep. Prog. Phys. **60**, 487 (1997).

SAGLASNOST PREDLOŽENOG/IH MENTORA I DOKTORANDA SA PRIJAVOM

Odgovorno potvrđujem da sam saglasan sa temom koja se prijavljuje.

Prvi mentor	Prof. dr Predrag Miranović	
Drugi mentor	Dr Željko Šljivančanin	
Doktorand	Mr Božidar Šoškić	

IZJAVA

Odgovorno izjavljujem da doktorsku disertaciju sa istom temom nisam prijavio/la ni na jednom drugom fakultetu.

U Podgorici,
07.05.2021.


Ime i prezime doktoranda
Božidar Šoškić