

OCJENA DOKTORSKE DISERTACIJE

OPŠTI PODACI O DOKTORANDU		
Titula, ime i prezime	Mr Božidar Šoškić	
Fakultet	Prirodno-matematički fakultet	
Studijski program	Fizika	
Broj indeksa	02/2018	
MENTOR/MENTORI		
Prvi mentor (UCG)	Prof. dr Predrag Miranović	Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet Crne Gore
Drugi mentor (UCG)	Dr Željko Šljivančanin	Institut za nuklearne nauke u Vinči, Univerzitet u Beogradu, Srbija
Prvi mentor (Univerzitet u Antverpenu, Belgija)	Prof. dr Milorad Milošević	Univerzitet u Antverpenu, Belgija
KOMISIJA ZA OCJENU DOKTORSKE DISERTACIJE		
Prof. dr Predrag Miranović	Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet Crne Gore	
Dr Željko Šljivančanin	Institut za nuklearne nauke u Vinči, Univerzitet u Beogradu, Srbija	
Prof. dr Milorad Milošević	Univerzitet u Antverpenu, Belgija	
Prof. dr Borko Vujičić	Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet Crne Gore	
Dr Marin Petrović	Institut za fiziku u Zagrebu, Hrvatska	
Dr Nenad Lazarević	Institut za fiziku u Zemunu, Univerzitet u Beogradu, Srbija	
Dr Francois Peeters	Univerzitet u Antverpenu, Belgija	
Datum značajni za ocjenu doktorske disertacije		
Doktorska disertacija i Izvještaj Komisije dostavljen Biblioteci UCG	13.05.2025	
Javnost informisana (dnevne novine) da su Doktorska disertacija i Izvještaj Komisije dati na uvid	14.05.2025	
Sjednica Senata na kojoj je izvršeno imenovanje komisije za ocjenu doktorske disertacije	27.03.2025	
Uvid javnosti		
U predviđenom roku za uvid javnosti je bilo primjedbi?	Ne.	
OCJENA DOKTORSKE DISERTACIJE		
1. Pregled disertacije (bibliografski podaci o disertaciji i sažetak disertacije)		
Primarna naučno-istraživačka oblast ove doktorske disertacije nalazi se u okviru fizike kondenzovanog stanja materije, sa posebnim fokusom na proučavanje magnetnih i superprovodljivih osobina dvodimenzionalnih (2D) kristalnih struktura bora, koji su među naučnicima poznati i pod nazivom borofeni. Dati materijali su privukli veliku pažnju naučne		

javnosti zbog svojih izuzetnih fizičkih osobina, među kojima se posebno izdvajaju visoka električna provodljivost, velika mehanička čvrstoća, intrinzična metalna „priroda“, kao i potencijal za ispoljavanje superprovodljivih osobina. Takve karakteristike čine borofene „superironim“ kandidatima među 2D materijalima koji se sastoje od samo jednog tipa atoma, sa potencijalom da prevaziđu čak i grafen u naprednim elektronskim i superprovodljivim primjenama.

Uprkos teorijski predviđenim obećavajućim fizičkim osobinama borofena, eksperimentalna potvrda istih i dalje izostaje. Štaviše, njihova sinteza predstavlja ozbiljan izazov, jer zahtijeva odgovarajuće podloge (supstrate) i strogo kontrolisane uslove „rasta“. Njihova sinteza je dodatno otežana prisustvom nečistoća, ograničenom kontrolom dimenzija uzorka i najvažnije, izraženoj podložnošću procesu oksidacije u ambijentalnim uslovima. Stoga je centralna tema ove doktorske disertacije usmjerena ka ispitivanju ovih sistema kao potencijalnih „platformi“ za stabilizaciju vještačkih 2D magneta ili kao materijala koji posjeduju kapacitet za ispoljavanje fononski posredovanih superprovodljivih osobina.

Radi boljeg razumijevanja složenosti istraživačkog problema, doktorska disertacija je organizovana u pet poglavlja koja obuhvataju ključne koncepte, sveobuhvatan pregled istraživanja, primijenjenje metodologije, kao i ključne rezultate uz jasno obrazložene zaključke i definisane naučne doprinose. Prije nego što se detaljnije pređe na suštinu istraživanja, čitaocu je dat kratak pregled istraživanja kroz apsrakt koji je napisan na tri jezika – engleskom, holandskom i crnogorskom (prošireni rezime) – u skladu sa ugovorom o zajedničkom doktoratu između Univerziteta Crne Gore i Univerziteta u Antverpenu. Završni dio disertacije obuhvata biografiju kandidata, listu publikacija, kao i standardne izjave koje su potrebne za predaju disertacije.

U nastavku izvještaja slijedi sažetak svake pojedinačne glave, sa naglaskom na ključne koncepte i rezultate.

Glava 1 uvodi čitaoca u oblast 2D materijala, počevši od pregleda njihovog značaja zaključno sa fokusiranom diskusijom o borofenima.

U poglavlju 1.1.1 se posebno izdvaja revolucionarno otkriće grafena (2D alotropske modifikacije ugljenika) 2004. godine, čije fizičke osobine prevazilaze one koje posjeduju konvencionalni trodimenzionalni (3D) materijali, posebno po složenosti i značaju. Ovo otkriće je dalje otvorilo put za istraživanje i sintezu različitih 2D materijala koji se ne sastoje od ugljenika, uključujući materijale iz „grafenske“ porodice, i druge potencijalne 2D materijale koji se sastoje od samo jednog tipa atoma. Uzimajući u obzir složenost njihove proizvodnje, poglavlje 1.1.2 pruža detaljan pregled njihove sinteze. Poglavlje 1.1.3 razmatra značaj različitih tehnika njihove karakterizacije, kao i njihove uloge u poboljšanju i optimizaciji proizvodnje 2D materijala za praktične primjene. Povrh toga, integracija 2D materijala u elektronske i opto-električne uređaje nameće dodatne izazove, prvenstveno zbog strogih uslova neophodnih za njihov rast, prenošenje (transfer) i ugradnju. Poglavlje 1.1.4 posebno ističe ključne tehnike prenosa (transfera) 2D materijala i diskutuje njihov značaj u omogućavanju njihove realne integracije u naprednim tehnološkim uređajima. Tehnike poput fotolitografije, litografije elektronskim snopom, ili „nano-otisak“ omogućavaju preciznu kontrolu oblika i dimenzija materijala, što je krucijalno za razvoj elektronskih i opto-električnih uređaja visokih preformansi. Poglavlje 1.1.5 detaljno istražuje ove metode oblikovanja, ističući njihov značaj za unapređenje tehnologije izrade uređaja i poboljšanja njihovih preformansi. Poglavlje 1.1.6 pruža uvid u post-transfer tehnike, i njihov potencijal da dodatno unaprijede funkcionalnost 2D materijala „otključavajući“ pri tom mogućnost za njihove nove savremene tehnološke inovacije.

Poglavlje 1.2.1 pruža koncizan, ali sadržajan istorijski pregled upotrebe bora, počevši od njegove upotrebe u formi borata pa sve do teorijskih predviđanja i kasnijeg ispitivanja slojeva 2D bora – borofena. Zatim je u poglavlju 1.2.2 prikazana sveobuhvatna analiza trenutnih metoda sinteze borofena, kao i njihove karakterizacije, posebno naglašavajući vezu između eksperimentalnih tehnika i teorijskog modelovanja putem metoda teorije funkcionala gustine (eng. DFT). U poglavlju 1.2.3 autor detaljno prikazuje fizičke osobine borofena, uključujući njihove promjenljive mehaničke, elektronske, termičke i optičke osobine.

Glava 2 opisuje metode koje su korišćene prilikom ispitivanja magnetnih i superprovodljivih osobina „čistih“ i funkcionalizovanih borofena i koje se prvenstveno baziraju na teoriji funkcionala gustine (eng. DFT), kao i njenim ekstenzijama kao što su spin-zavisni DFT formalizam (SDFT) i perturbaciona teorija funkcionala gustine (DFPT). Poglavlje 2.1 pruža koncizan uvod u DFT formalizam za modelovanje materijala u osnovnom stanju pomoću elektronske gustine, koja figuroše kao glavna fizička veličina umjesto složene talasne funkcije višestručnog sistema. Poglavlje 2.2 proširuje DFT formalizam na magnetne sisteme tako što eksplicitno uključuje spinske stepene slobode. Štaviše, uključivanje relativističkih efekata, posebno spin-orbit sprege (eng. SOC), je ključno za precizno opisivanje magnetne anizotropije i drugih značajnih spinski-zavisnih fenomena. Ovaj formalizam pruža osnove za računanje osnovnih magnetnih stanja, izmjenskih interakcija, kao i spinskih tekstura u kompleksim materijalima. Poglavlje 2.3 se bazira na SDFT formalizmu za proučavanje mikroskopskih izvora magnetizma u materijalima, fokusirajući se na fundamentalne mehanizme koji dovode do dugodometnog magnetnog uređenja. Poglavlje 2.4 uvodi perturbacionu teoriju funkcionala gustine (DFPT) kao ključnu ekstenziju DFT formalizma koja omogućava računanje frekvencija fonona preko drugih izvoda ukupne energije sistema. DFPT takođe pruža osnovu za računanje elektron-fonon matičnih elemenata, koji su ključni za razumijevanje superprovodljivosti. Poglavlje 2.5 prezentuje teorijske osnove superprovodljivosti, sa akcentom na fononski posredovan mehanizam i metodologiju za njegovo modelovanje iz prvih principa.

U glavi 3, magnetne osobine dvije klase sistema koji se baziraju na borofenima su istraživani: Fe nanostrukture adsorbovane na β_{12} borofenu koji se nalazi na Ag(111) supstratu, kao i metalima interkaliranom dvosloju borofena. Poglavlje 3.1 ispituje magnetno ponašanje Fe nanostrukture na β_{12} borofenu koji se nalazi na Ag(111) supstratu, upotrebom SDFT metoda i analizom različitih spinskih modela. Sa druge strane, poglavljje 3.2 se fokusira na 3d metalima interkaliranom dvosloju β_{12} borofena, posebno Mn kao interkalantom koji je identifikovan kao jedina dinamička stabilna konfiguracija koja je u stanju da očuva i određenu vrijednost magnetnog momenta.

Glava 4 se fokusira isključivo na superprovodljive osobine 2D materijala koji se baziraju na borofenima, sa posebnim osvrtom na čisti β_{12} borofen, kao i njegove hidrogenizovane konfiguracije, i metalima interkaliranim dvoslojnim strukturama. Suprotno prethodnim teorijskim predviđanjima koja predviđaju intrinzične superprovodljive osobine borofena u slobodnoj formi (bez supstrata), istraživanja koja su prikazana u poglavlju 4.1 pokazuju da čisti sloj borofena je dinamički nestabilan sve dok se ne istegne struktura ravnomjerno duž oba vektora kristalne rešetke – što se može pripisati efektu supstrata. Hidrogenizacijom β_{12} borofena značajno se poboljšavaju i njegova strukturalna stabilnost i superprovodljive osobine. Prilikom modifikacije uslova istezanja ili koncentracije nosioca naelektrisanja (dopiranje šuplinama) anizotropna superprovodljiva kritična temperatura (T_c) može dostići vrijednost od 30 K posjedujući prirodu superprovodnika sa jednim procjepom. Dati rezultati pružaju realističan pravac za eksperimentalno ispitivanje, posebno uzimajući u obzir najnoviji pogres u prenošenju (transferu) borofena na nemetalne supstrate. Osim

jednog sloja borofena, istraživanja su proširena – u poglavlju 4.2 – i na interkalirane dvosloje β_{12} , χ_3 , δ_4 , i kagome faza borofena. Sistematskim uključivanjem interkalanata iz grupe alkalnih, zemno alkalnih i prelaznih metala identifikovano je 17 stabilnih superprovodljivih kandidata. Sve u svemu ova glava potvrđuje da su materijali zasnovani na borofenu veoma raznovrsna platforma za inženjering visoko temperaturnih superprovodnika u niskim dimenzijama, sa obećavajućim primjenama u nano elektronici i kvantnim uređajima.

Konačno, glavni zaključci rada su sumirani u glavi 5.

2. Vrednovanje disertacije

- 2.1. Problem (Navedi neriješena i kontraverzna mišljenja o istraživačkom problemu i dosadašnjim pokušajima rješavanja problema, rješenja do kojih su došli drugi autori, ocjenu osnove disertacije u skladu sa radovima i istraživanjima kandidata i način njihove veze sa samom disertacijom).

Iako je borofen intrinzično nemagnetan, on može da ispoljava spinski-polarizovano ponašanje kroz formiranje defekata ili dopiranjem prelaznim metalima, bez tendencije ka klasterizacijidodatih atoma koja se uobičajno javlja kod grafena. Rana istraživanja su pokazala da jedno- i dvo-atomske šupljine u β_{12} and χ_3 borofenu mogu indukovati lokalne magnetne momente; međutim oni su uglavnom veoma slabi ($<0.5-1 \mu_B$) i osjetljivi na geometriju šupljina, kao i koncentraciju nosilaca naelektrisanja. Međutim iako je demonstrirana mogućnost dugodometnog feromagnetnog uređenja posredstvom slobodnih p elektrona i RKKY interkacije, magnetizam kontrolisan defektima ostaje ograničen njegovom osjetljivom („krhkom“) prirodom i nedostatkom poboljšanja (modifikacije) osobina. Štaviše, prethodni pokušaji zamjene bora nemetalnim atomima (npr. H, N ili C) nisu uspjeli da dodatno poboljšaju ili stabilizuju dato magnetno ponašanje. Ispitivanje uticaja dopiranja prelaznim metalima, iako više obećavajuće – posebno ako se dopira 3d metalima kao što su Cr, Mn, i Fe – uglavnom se fokusiralo na stabilnost, energiju vezivanja i spinske magnetne momente, bez dubljeg razumijevanja mikroskopskog izvora izmjenskih interakcija. Ova disertacija efikasno prepoznaje tu „prazninu“ u postojećoj literaturi i daje značajan doprinos tako što prevazilazi fenomenološke opise i primjenjuje napredne metode iz prvih principa radi razotkrivanja fundamentalnih mehanizama magnetnog uređenja. Time se postavlja kritički teorijski temelj za buduće istraživanje magnetnog inženjeringa u 2D materijalima baziranih na borofenu.

Pored toga, prema BCS teoriji, materijali sastavljeni od lakih elemenata čine „prirodne“ kandidate za visokotemperaturne superprovodnike usljed njihove jake elektron-fonon interakcije. Dok većina 2D materijala poput grafena, silicena, i fosforena zahtijevaju određene dodatne modifikacije – poput istezanja ili dopiranja – kako bi se indukovala slaba superprovodljivost, borofen se izdvaja zahvaljujući njegovoj intrinzičnoj metalnoj prirodi i jakoj teorijski predviđenoj elektron-fonon interakciji. Ranije studije zasnovane na proračunima iz prvih principa predviđele su umjerene T_c vrijednosti (12-24 K) za β_{12} and χ_3 faze; međutim, ovi modeli su uglavnom bazirani na idelizovanim strukturama, u slobodnoj formi (bez supstrata), za koje je kasnije pokazano da su dinamičke nestabilne. Ekperimentalne potvrde i dalje izostaju: kritične temperature zasnovane na Raman mjerenjima pokazuju znatno niže temperature (7-10 K), i nijedan trag superprovodljivosti još nije zabilježen drugim eksperimentalnim tehnikama. Ova teza revizira dati problem iz perspektive proračuna iz prvih principa, pokazujući da čista faza β_{12} borofena je dinamički stabilna samo pri istezanju, ali bez ikakvih tragova superprovodljivog ponašanja. Štaviše, pokazano je da hidrogenizacija ipak uvećava T_c vrijednosti, za razliku od ranijih radova, i da se sa dodatnim istezanjem ili dopiranjem šupljinama date vrijednosti mogu povećati do 30 K. Dodatno,

sveobuhvatna, anizotropna Migdal-Eliašberg analiza različitih dvoslojnih konfiguracija pokazala je da je superprovodljivost u borofenima veoma osjetljiva na orbitalni doprinos i karakter stanja na Fermijevom nivou, sa interkaliranim dvoslojima kao što je Ca-kagome sistemom, koji može dostići T_c od 58 K. Ovi rezultati razjašnjavaju protivrječnosti koje se javljaju u literaturi i definišu jasne pravce za dalja eksperimentalna istraživanja.

2.2. Ciljevi i hipoteze disertacije

Centralni ciljevi i radne hipoteze ove teze se mogu jasno formulirati kroz sljedeća istraživačka pitanja:

1. Imajući u vidu njegovu izraženu hemijsku reaktivnost, kao i pravilno uređenje njegovih heksagonalnih šupljina, da li borofen posjeduje potencijal da posluži kao platforma za adsorpciju, formiranje, kao i stabilizaciju vještačkih 2D magneta na njemu?
2. Ako je odgovor potvrđan, da li se jedan takav interkalirani 2D magnetni sistem može formirati i stabilizovati u dvosloju borofena, s obzirom na to da ove konfiguracije pokazuju povećanu otpornost na proces oksidacije i samim tim nude veći potencijal za primjenu u spontronici?
3. Iako su ranija istraživanja sugerisala da je čisti β_{12} borofen intrinzični superprovodnik, eksperimentalna potvrda još uvijek izostaje. To otvara ključno pitanje: da li su raniji teorijski modeli zaista pouzdani, i da li hidrogenizacija može doprinijeti i stabilizaciji i zaštititi ove strukture od oksidacije?
4. Konačno, može li interkalacija u dvoslojnim konfiguracijama različitih faza borofena dovesti do otkrića idealnog kandidata za superprovodljivost?

- 2.3. Bitne metode koje su primijenjene u disertaciji i njihovu primjerenost. Ako je primijenjena nova ili dopunjena metoda, opišite šta je novo.

Podaci koji su prikazani u ovom radu su dobijeni kroz proračune iz prvih principa koji se baziraju na DFT metodi, korišćenjem niza savremenih kompjuterskih softverskih paketa, kao što su Quantum ESPRESSO, VASP, Wien2k, GPAW, Phonopy, Wannier90, i EPW.

Za proučavanje magnetizma, SDFT proračuni su izvršeni, uključujući „ograničene“ nekolinearne spinske proračune, kako bi se dobili parametri izmjenske interakcije. Primarni proračuni elektronske strukture dobijeni su uz pomoć VASP, Quantum ESPRESSO, i Wien2k koda, u zavisnosti od simetrije i numeričkih zahtjeva konkretnih razmatranih sistema. Nakon toga, konstruisane su maksimalno lokalizovane Vanijeove funkcije uz pomoć Wannier90 koda, čime je omogućeno precizno mapiranje *ab initio* rezultata na bazu lokalnih funkcija. Magnetne izmjenske interakcije su zatim „izvučene“ korišćenjem dva komplementarna pristupa: metodom četiri stanja (eng. 4SM) i TB2J koda, koji koristi formalizam Grinovih funkcija i model jake veze (zasnovanom na Vanijeovim funkcijama), za računanje izotropnih i anizotropnih izmjenskih tenzora. Jedan od metodološki značajnijih doprinosa ove disertacije je upotreba metoda sukcesivnog uključivanja „hopping-a“ (eng. SHIM) kojim se objašnjava mikroskopsko porijeklo magnetnih izmjenskih interakcija. Dok su se ranije metode uglavnom oslanjale na shematski prikaz (ilustraciju) superizmjenskog mehanizma, često tretirajući nekoliko izmjenskih kanala kolektivno i kvalitativno, SHIM pristupa problemu sistematski i kvantitativno. Ovaj metod postepeno uključuje „hopping-e“ između različitih orbitala tako što postepeno smanjuje prag za „hopping“ parametar $\tau < |t|$, omogućavajući time identifikaciju i razdvajanje pojedinačnih izmjenskih putanja u bazu funkcija sa odgovarajućim orbitalnim karakterom. Ovaj pristup omogućava identifikaciju i izolaciju

određenih „hopping“ putanja koji su odgovorni za mikroskopski magnetni mehanizam – kao što je direktna, superizmjenska ili super-superizmjenska interakcija – i koji daju doprinos totalnom magnetnom sparivanju. Ovo predstavlja značajan napredak u odnosu na konvencionalne, nejasne analize. Na kraju, izvučeni članovi Hajzenbergovih hamiltonijana se koriste kao input za klasične Monten Karlo simulacije kako bi se odredile termodinamičke osobine materijala, kao npr. Kirijeva temperatura ili magnetna fazna stabilnost.

Za proučavanje superprovodljivih osobina, metodologija kombinuje prezizne DFT proračune osnovnog stanja sistema i DFPT proračune za dobijanje matičnih elemenata elektron-fonon sprege (EPC). Oni su primarno dobijeni upotrebom Quantum ESPRESSO programa, a zatim putem EPW softverskog paketa koja omogućava Vanijeovu interpolaciju kako bi se dobila velika rezolucija EPC podataka na gustim k/q mrežama. Početne procjene superprovodljivih kritičnih temperatura dobijene su pomoću MAD formule u izotropnoj aproksimaciji. Da bi se „uhvatila“ anizotropija i mogućnost da superprovodnik posjeduje više superprovodljivih procjepa, u potpunosti su riješene anizotropne Migdal-Eliašberg jednačine korišćenjem EPW alata, što je omogućilo detaljno razumijevanje superprovodljivog procjepa u funkciji od vektora momenta impulsa i orbitalnog karaktera mehanizma sparivanja. Pored toga ova disertacija uvodi nekoliko metodoloških unapređenja u cilju pouzdanijeg i fizički preciznijeg simuliranja superprovodljivih osobina 2D materijala koji se baziraju na atomu bora. Prvo, da bi se obuhvatili efekti elektrostatičkog gejtina, FET konfiguracija je implementirana sa ravanskom elektrostatičkom barijerom u oblasti vakuuma, omogućavajući realističnije neuniformno dopiranje razmatranih sistema. Drugo, umjesto upotrebe standardnih pravila za akustičnu sumu (eng. ASR) konstanti međuatomskih sila u tezi je korišćen Born-Hunag uslov invarijantnosti, koji omogućava preciznu implementaciju translacionih i rotacionih simetrija za pravilno opisivanje nisko- q ponašanja fleksuralnih fonona, koji su od presudnog značaja za 2D sisteme. Ova korekcija je omogućila i preciznije određivanje dinamičke stabilnosti usljed većih nivoa dopiranja (do 0.12 e/B), u poređenju sa limitom od 0.03 e/B u slučaju standardnih ASR pravila. Na kraju, razvijen je i poseban alat za naknadnu obradu podataka, koji omogućava direktno mapiranje jačine elektron-fonon sprege (EPC) na grafike za fononsku disperziju, pružajući vizuelnu i kvantitativnu reprezentaciju jačine EPC kroz Brilluenuovu zonu.

Dati metodološki doprinosi značajno poboljšavaju tačnost predviđanja superprovodljivih osobina usljed realnih uslova istezanja i dopiranja. Sve u svemu, metodologija predstavlja najsavremeniji sveobuhvatni kompjuterski okvir za kombinovanje elektronskih, magnetnih, i vibracionih stepeni slobode za sistematsko testiranje i predviđanje kvantnih osobina 2D materijala baziranih na atomu bora.

2.4. Rezultati disertacije i njihovo tumačenje

Ova disertacija predstavlja detaljno i sistematsko ispitivanje magnetnih i superprovodljivih osobina 2D materijala zasnovanih na boru iz prvih principa, sa posebnim fokusom na jedan sloj β_{12} borofena kao i dvoslojne konfiguracije β_{12} , χ_3 , δ_4 , i kagome borofena. Ovo istraživanje pruža uvid u način kako modifikacije na atomskom nivou – kao što su adsorpcija prelaznih metala, interkalacija, hidrogenizacija, istezanje, ili diopiranje naelektrisanjima – upravljaju pojavom i prolagodljivošću kvantnih fenomena kao što su magnetizam i superprovodljivost.

U domenu magnetizma, SDFT proračuni u kombinaciji sa Monte Karlo simulacijama otkrivaju da Fe atomi preferiraju da se adsorbuju napraznim heksagonalnim šuplinama (eng. HH) β_{12} borofena koji se nalazi na Ag(111) supstratu, kreirajući pri tom linearne nanostrukture koje prate simetriju rešetke borofena. Kada su Fe atomi postavljeni ispod sloja borofena (interkalisani između borofena

i supstrata srebra), sistem ispoljava poboljšanu termodinamičku stabilnost. Međutim, usljed značajne energetske barijere za difuziju kroz HH, Fe strukture koje su adsorbovane na površini borofena mogu da opstanu kao „metastabilne“ konfiguracije. Magnetna analiza pokazuje da je prisutna feromagnetna interakcija unutra Fe lanaca i slabija anti feromagnetna interakcija između njih. Izvučene Hajzenbergove konstante izmjenjske interakcije su uključene u klasične Monte Karlo simulacije, čime su dobijene Kirijeve temperature of 105 K (prilikom površinske adsorpcije) i 30 K (za slučaj kada je interkaliran), što pokazuje da je magnetno uređenje robusno i da se magnetizam na sobnoj temperaturi ne može postići. Dobijeni rezultati sugerišu da bi zamjena Fe atoma sa Co dalje poboljšala T_c usljed posjedovanja veće anizotropne energije.

Mikroskopsko razumijevanje magnetizma u Mn-interkaliranim dvoslojima β_{12} borofena dobijeno je upotrebom 4SM metoda i TB2J formalizma. Naime, TB2J metod je omogućio detaljnu analizu izmjenjskih interakcija sa odgovarajućim orbitalnim karakterom. Za prve najbliže susjede (eng. NN) feromagnetno sparivanje je uzrokovano direktnim preklapanjem d_{yz} - d_{yz} , dopunjeno sa $d_x^2 - y^2$ superizmjenjskom interakcijom koja je posredovana B- p_z orbitalama. Za interakcije koje su dale od prvog najbližeg susjeda, superizmjenjska interakcija ostaje dominantna, posebno duž y-ose, gdje d_{xy} - d_{xy} i d_z^2 - d_z^2 kanali daju najveći doprinos. Dugodometne interakcije, kao što su 4NN i 5NN iskazuju kompleksno ponašanje, uključujući superizmjenjsku interakciju i složenije „putanje“ interakcije, što ukazuje na prisustvo bogate fizike magnetizma i opravdava dalje istraživanje za spintronske primene.

Što se tiče superprovodljivosti, rad doprinosi kritičkom preispitivanju intrinzičnih osobina β_{12} borofena. Suprotno ranijim teorijskim tvrdnjama, disertacija ustanovljava da je β_{12} borofen u slobodnoj formi (bez supstrata) dinamički nestabilan i da ne podržava superprovodljivost pod realnim uslovima. Ovo ponašanje je rezultat suzbijanja doprinosa B- σ stanja gustini elektronskih stanja (eng. DOS) na Fermijevom nivou, posebno pod uticajem deformacija (istezanje). Nasuprot tome, hidrogenizovani β_{12} borofen (borofan) pokazuje dinamičku stabilnost i pojavu superprovodljivosti. Kada se H atomi adsorbuju na „mostovima“ (B-H-B), struktura dostiže superprovodljivu kritičnu temperaturu od 6.3 K, koja se dalje može povećati na 28.6 K pod +5% istežanja duž jednog vektora kristalne rešetke (duž hidrogenizovanih „mostova“). Ovo povećanje je direktno povezano sa povećanim doprinosima B- σ i B- p_z orbitala u blizini Fermijevog nivoa. Uloga dopiranja je dalje istražena korišćenjem FET modela koji uzima u obzir realnije neuniformno dopiranje elektronima (šupljina). Istraživanje otkriva da standardna ASR pravila ograničavaju stabilnost na niske nivoe doziranja šupljina (~ 0.03 e/B), dok Born-Huang uslovi produžavaju dinamičku stabilnost do ~ 0.12 e/B.

Dodatno, sistematsko sveobuhvatno ekraniranje je izvedeno na interkaliranim (sa 9 različitih atoma) dvoslojima borofena (četiri različite faze). Korišćenjem DFPT-a i izotropne Eliašbergove teorije, identifikovano je 17 stabilnih superprovodljivih konfiguracija, sa T_c vrednostima koje dostižu i 27.1 K. U slučaju interkalirane β_{12} faze, kod koje dominiraju p_z orbitale, prisutna je slaba elektron-fonon interakcija i niske vrijednosti T_c (~ 0.1 –1 K), dok u slučaju χ_3 , δ_4 i kagome faze – posebno one sa Ca i Mg – pokazuju značajno više vrijednosti T_c zbog pojačanih σ orbitalnih doprinosa na Fermijevom nivou i jakom elektron-fonon interakcijom. Najperspektivniji sistem, Ca-interkalirani kagome dvosloj borofena, dostiže T_c vrijednosti od čak 58 K rješavanjem anizotropnih Migdal-Eliašberg jednačina, podržan povoljnim „nesting“ efektima Fermijeve površine i snažnom orbitalnom hibridizacijom. Ovi rezultati naglašavaju značaj „podešavanja“ orbitalnog karaktera na Fermijevom nivou i balansiranja veza u ravni i izvan ravni kako bi se optimizovao superprovodljivi efekat.

Na kraju, razvijen je prilagođeni alat za postprocesiranje koji projektuje jačinu elektron-fonon sprege u funkciji od impulsa na fononsku disperziju, omogućavajući time identifikaciju dominantnih fononskih kanala koji doprinose superprovodljivosti. Ova analiza je pokazala da visoko-frekvencijski fononi u ravni koji su u sprezi sa σ stanjima, igraju centralnu ulogu u visokotemperaturnim fazama.

2.5. Zaključci (usaglašenost sa rezultatima i logično izvedeno tumačenje)

Ova disertacija doprinosi značajnom napretku u razumijevanju i inženjeringu kvantnih osobina borofena i njegovih derivata, svrstavajući ove sisteme među vodeće u istraživanjima 2D materijala. Pokazano je da β_{12} borofen može da posluži kao dobra platforma za stabilizaciju i formiranje dobro uređenih 2D magnetnih nanostrukture, kao što su dodati Fe atomi koji formiraju feromagnetne lance ili Mn interkalirani dvosloji koji posjeduju dugodometno magnetno uređenje usljed određenih superizmjenskih interakcija (sa određenim orbitalnim karakterom). Ovi uvidi daju prvi orbitalnu karakterizaciju magnetizma u borofenu i naglašavaju značaj ovih materijala za integraciju u spontronske platforme.

U domenu superprovodljivosti, rad pobija prethodne teorijske tvrdnje o intrinzičnoj superprovodljivosti u „čistom“ β_{12} borofenu, nudeći kritičku reinterpretaciju koja se bazira na stabilnosti i analizi elektron-fonon interakcije. Hidrogenizovane i interkalisane strukture se pojavljuju kao superiorne alternative, pri čemu borofan posjeduje poboljšane vrijednosti T_C – do 30 K – dok u slučaju Ca-interkaliranog kagome dvosloja borofena može se dostići i vrijednost od 60 K. Ova otkrića ne samo da pružaju jasan plan za eksperimentalno ispitivanje ovih sistema već naglašavaju i značaj prilagođavanja orbitalnog karaktera, geometrije Fermijeve površine, kao i hemijske stabilnosti u dizajniranju naprednih 2D superprovodnika. Uzimajući sve u obzir, ova disertacija pokazuje da funkcionalizovani borofeni mogu da posluže kao obećavajuća platforma za buduće kvantne tehnologije, spajajući oblasti spintronike i superprovodljivosti.

3. Konačna ocjena disertacije

3.1. Usaglašenost sa obrazloženjem teme

Rad je u potpunosti usaglašen sa obrazloženjem teme.

3.2. Mogućnost ponovljivosti

Disertacija je zasnovana na robustnoj i transparentnoj računarskoj osnovi, koja se uglavnom oslanja na metode zasnovane na prvim principima, kao što su SDFT, DFPT i anizotropni Migdal–Eliashberg formalizam. Standardni i široko usvojeni softverski paketi – Quantum ESPRESSO, VASP, Wannier90, EPW i Phonopy – čine jezgro simulacionog toka rada. Svi ključni računarski parametri su pažljivo predstavljani i sistematski testirani kroz cjelokupnu disertaciju. Ovaj nivo detalja osigurava da se, u principu, rezultati mogu u potpunosti ponoviti od strane drugih istraživača.

Međutim, određeni aspekti metodologije – poput Vanijejacije „zamršenih“ elektronskih zona u borofenskim sistemima i rješavanja anizotropnih superprovodničkih jednačina procjepa – su inherentno složeni i mogu zahtijevati intervenciju od strane eksperata. Tačna konstrukcija maksimalno lokalizovanih Vanijejovih funkcija u ovim složenim sistemima posebno je osjetljiva na izbor početnih projekcija i energetskih prozora, što često zahtijeva „ručnu“ doradu. Takođe,

selektivni postprocesing zadaci – kao što je mapiranje elektron-fonon jačine u funkciji od impulsa na grafik disperzije fonona – obavljani su korišćenjem određenih skripti, koje, iako opisane, nisu dio standardnih softverskih paketa i morali bi se nezavisno replicirati.

Uz pristup odgovarajućim superračunarskim resursima i tehničkom stručnošću u naprednim elektronkim metodama, osnovni rezultati ovog rada se mogu ponoviti. Jasnoća prikazane dokumentacije, validacija rezultata, kao i metodološka dosljednost, u cjelosti pružaju čvrst temelj za pouzdano i ponovljivo istraživanje u ovoj oblasti.

3.3. Buduća istraživanja

Rezultati ove disertacije otvaraju više obećavajućih pravaca za buduća istraživanja u oblasti 2D bor-baziranih materijala. U domenu magnetizma, dalja istraživanja interkalacije prelaznim metalima u dvosloju borofena - posebno sa elementima koji posjeduju velike energije anizotropije - mogu olakšati razvoj robusnih 2D magneta koji funkcionišu na ili blizu vrijednosti sobne temperature. Precizno tretiranje elektronskih korelacija, uključujući pažljiv odabir „on-site“ Hubbardovog U parametra, biće ključno za opisivanje osnosa hibridizacije i vrijednosti magnetnih momenata. Eksperimentalna sinteza i magnetna karakterizacija takvih interkaliranih dvoslojnih sistema ostaju sljedeći bitni korak, gdje rezultati predstavljeni u ovoj disertaciji mogu poslužiti kao odgovarajuće smjernice.

U domenu superprovodljivosti, uloga anharmoničnih efekata kristalne rešetke – iako se očekuje da budu zanemarljivi u hidrogenizovanom borofenu – zaslužuje dalja teorijska istraživanja kako bi se potvrdila robusnost predviđenih poboljšanja T_C vrijednosti. Eksperimentalni naponi su hitno potrebni kako bi se potvrdila prisutnost ili odsutnost superprovodljivosti u „čistim“ i hidrogenizovanim fazama borofena. Na kraju, za metal-interkalirane dvosloje borofena, koji posjeduju visoke vrijednosti T_C , posebno u Ca- i Mg-interkaliranim kagome i χ_3 fazama, eksperimentalna sinteza i merenja transporta biće ključna za potvrdu teorijskih predviđanja. Buduća istraživanja bi trebalo da razmotre i modeliranje na nivou uređaja za ove sisteme u realnim uslovima, uključujući njihovu interakciju sa izabranim podlogama, kao i integraciju u heterostrukture i elektrostatički kontrolisane spojeve, kako bi se procijenio njihov tehnološki potencijal u kvantnim i nano superprovodljivim platformama.

3.4. Ograničenja disertacije i njihov uticaj na vrijednost disertacije

Nema specifičnih ograničenja.

Originalni naučni doprinos

(dati pojašnjenje: originalnost (sasvim nova saznanja, dopuna/proširenje postojećeg znanja ili pobijanje postojećeg znanja), uticaj rezultata disertacije na napredak naučne oblasti, uticaj rezultata na struku (direktno, indirektno))

Ova disertacija pruža originalne i značajne doprinose na više frontova istraživanja niskodimenzionalnih materijala. Magnetna svojstva Fe-dekorisanog β_{12} borofena na Ag(111) podlozi istražena su po prvi put, prema kvantitativnom okviru, daleko od jednostavnih shematskih tretmana, pružajući osnovu za nanostrukturisani 2D magnetizam u sistemima podržanim različitim podlogama. Paralelno, rad nudi prvo mikroskopsko razlaganje magnetnih izmjenskih interakcija u Mn-interkaliranom dvosloju borofena, uvodeći jasno orbitalno razloženo razumevanje feromagnetne sprege u hemijski stabilnim konfiguracijama.

S druge strane, u oblasti superprovodljivosti, disertacija pobija dugogodišnje teorijske pretpostavke o intrinzičnoj superprovodljivosti u „čistom“ β_{12} borofenu. Umjesto toga, identifikuje hidrogenizaciju kao održiv put ka dinamičkoj stabilizaciji i poboljšanom T_c . Na kraju, disertacija proširuje granice bor-baziranih superprovodnika identifikovanjem klase interkaliranih dvoslojnih sistema sa snažnom elektron-fonon interakcijom i prilagodljivoj prirodi superprovodljivih procjepa.

Kumulativni uticaj ovog rada leži u redefinisaju realističnih strategija dizajniranja materijala za 2D magnetizam i superprovodljivost, sa direktnim implikacijama za spintronske i superprovodničke uređaje.

Mišljenje i prijedlog komisije

(dati mišljenje i prijedlog)

Doktorska disertacija kandidata Božidara Šoškića, pod nazivom „Magnetizam i superprovodljivost u dvodimenzionalnim (2D) kristalnim strukturama bora“, predstavlja originalno i naučno značajno istraživanje koje doprinosi novim teorijskim uvidima, kao i kritičkoj reevaluaciji postojećeg znanja u oblasti kvantnih materijala. Rezultati su objavljeni u tri recenzirana naučna časopisa:

1. Božidar N. Šoškić, Jonas Bekaert, Cem Sevik, and Milorad V. Milošević, “Enhanced Superconductivity of Hydrogenated β_{12} Borophene”, *Nano Letters* **24** (40), 12650–12657, 2024
American Chemical Society
DOI: 10.1021/acs.nanolett.4c03845
URL: <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.4c03845>

Q1

2. Božidar N. Šoškić, Jonas Bekaert, Cem Sevik, Željko Šljivančanin, and Milorad V. Milošević, “First-principles exploration of superconductivity in intercalated bilayer borophene phases”, *Physical Review Materials* **8** (6), 064803, 2024
American Physical Society
DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.8.064803
URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevMaterials.8.064803>

Q1

3. Božidar N. Šoškić, Srdjan Stavrić, and Željko Šljivančanin, “Ab-initio and Monte Carlo study of Fe-based two-dimensional magnets at borophene supported by Ag (111) surface”, *Physical Review Materials* **5** (7), 074001, 2021
American Physical Society
DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.5.074001
URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevMaterials.5.074001>

Q1

uz dodatni rad koji je trenutno u pripremi, što dodatno potvrđuje naučnu vrednost i relevantnost rada.

Nakon pažljivog pregleda disertacije, njenog naučnog sadržaja, metodološke rigoroznosti i objavljenih rezultata, Komisija zaključuje da je kandidat ispunio akademske i istraživačke standarde potrebne za sticanje dokorskog stepena. Provjera na plagijat je izvršena sa zadovoljavajućim rezultatima.

U skladu s tim, Komisija sa zadovoljstvom predlaže Vijeću Prirodno-matematičkog fakulteta Univerziteta Crne Gore da prihvati doktorsku disertaciju Božidara Šoškića, te preporučuje Senatu Univerziteta Crne Gore imenovanje Komisije za javnu odbranu doktorske disertacije.

Izdvojeno mišljenje

(popuniti ukoliko neki član komisije ima izdvojeno mišljenje)

Ime i prezime _____			
Napomena			
(popuniti po potrebi)			
KOMISIJA ZA ODBRANU DOKTORSKE DISERTACIJE			
Prof. dr Predrag Miranović, redovni profesor	Univerzitet Crne Gore, Crna Gora	Fizika kondenzovanog stanja materije	<i>Miranović Predrag</i>
Prof. dr Borko Vujičić, redovni profesor	Univerzitet Crne Gore, Crna Gora	Fizika kondenzovanog stanja materije	<i>Borko Vujičić</i>
Dr Željko Šljivančanin, naučni savetnik	Institut za nuklearne Nauke Vinča, Univerzitet u Beogradu, Srbija	Fizika kondenzovanog stanja materije	<i>Željko Šljivančanin</i>
Dr Nenad Lazarević, naučni savetnik	Institut za fiziku u Zemunu, Univerzitet u Beogradu, Srbija	Fizika kondenzovanog stanja materije	<i>Nenad Lazarević</i>
Dr Marin Petrović, viši znanstveni suradnik	Institut za fiziku u Zagrebu, Hrvatska	Fizika kondenzovanog stanja materije	<i>Marin Petrović</i>
Prof. dr Milorad Milošević, redovni profesor	Univerzitet u Antverpenu, Belgija	Fizika kondenzovanog stanja materije	<i>Milorad Milošević</i>
Prof. dr François Peeters, redovni profesor	Univerzitet u Antverpenu, Belgija	Fizika kondenzovanog stanja materije	<i>François Peeters</i>
Datum i ovjera (pečat i potpis odgovorne osobe)			
U Podgorici, 30.05.2025		DEKAN	
MP			