

Извјештај Комисије за оцјену подобности теме магистарског рада кандидата Божидача Шошкића

Вијеће Природно-математичког факултета не сједници одржаној 4. 9. 2018. именовало је ментора и Комисију за оцјену подобности теме за израду магистарског рада под називом "Магнетне примјесе у дводимензионалним материјалима са тачкастим структурним дефектима", кандидата Божидача Шошкића, у саставу: др Борко Вујичић, редовни професор – ментор, др Предраг Мирановић, редовни професор – члан и др Гордана Јовановић, доцент – члан.

Након увида у поднесени материјал, а у вези са чланом 24 Правила студирања на постдипломским студијама, подносимо слjedeћи

Извјештај

Подаци о кандидату

Божидац Шошкић рођен је 26. фебруара 1995. године у Еинсиеделну – Швајцарска. Завршио је основну школу „Вукашин Радуновић“ у Беранама 2009. године. За одличан успјех током школовања награђен је дипломом „Луча“, а био је и учесник на државном такмичењу из биологије – ИЦЦГ 2009. године. Средњу школу ЈУ Гимназија „Панто Малишић“ завршио је у Беранама 2013. године. Такође, за одличан успјех током школовања награђен је дипломом „Луча“, а био је и учесник на државном такмичењу из њемачког језика – ИЦЦГ 2013. године, на којем је освојио четврто мјесто. Стекао је BSc степен из физике на Природно-математичком факултету Универзитета Црне Горе 2016. године. На такмичењу „Најбоља студентска идеја 2015“ освојио је треће мјесто. Исте године радио је кратко као водич на изложби „ЦЕРН у Црној Гори – чудесни свијет честица“. На такмичењу „Тимски дизајн – ЕВЕС“ освојио је треће мјесто 2016. године. Стекао је и степен Spec. sci из физике на Природно-математичком факултету Универзитета Црне Горе 2017. године. Тренутно је студент Msc студија физике на Природно-математичком факултету Универзитета Црне Горе. Влада њемачким језиком – ниво Ц1, и енглеским – ниво Б2, служи се литературом и на руском језику. Божидац Шошкић влада програмским језицима FORTRAN и Python.

Предмет истраживања и актуелност теме

Предмет истраживања у овом раду биће додавање атома никла, кобалта и гвожђа у графен и хексагонални бор-нитрид (h-BN), код којих постоје тачкасти структурни дефекти и истраживање магнетних особина у овим дводимензионалним кристалима.

Графен је дводимензионални (2D) материјал који је, због својих електронских, термичких и оптичких особина, као и изузетне механичке стабилности, један од главних предмета истраживања у физици кондензоване материје, а веома је погодан и као материјал за изучавање различитих квантних ефеката. Он је уједно и први дводимензионални кристал који је откривен у природи, иако се постојање таквих кристала дуго оспоравало.

Други 2D материјал сличне кристалне структуре, али са атомима бора и азота уместо угљеника, јесте хексагонални бор-нитрид (h-BN). Што се особина h-BN-а тиче, он је термички и хемијски јако стабилан и, за разлику од графена, посједује све особине једног изолатора

Додавањем атома феромагнетних метала (Ni, Co и Fe) на графену или h-BN отвара се могућност образовања нових дводимензионалних магнетних материјала. Због високе покретљивости на идеалном графену или h-BN, за стабилност адсорбованих атома неопходно је постојање структурних дефеката у поменутим 2D материјалима. Тачкасти дефекти у виду атома који недостају (тзв. шупљине) најједноставнији су и међу најчешћим дефектима присутним у 2D кристалима. Основне физичке особине графена и h-BN са једно- и дво-атомским шупљинама, на којима су додати никл, кобалт и гвожђе биће истраживане примјеном теорије функционала густине (DFT).

Очекујемо да атоми разматраних феромагнетних метала образују везе различите јачине при адсорпцији на тачкастим дефектима на графену и h-BN, при чему јачина везе зависи и од врсте дефеката (једно- или дво-атомске шупљине) као и од врсте 2D материјала (графен или h-BN). Као последица тога очекујемо да код неких од адсорбованих атома долази до губитка сталног магнетног момента. Код других постоји могућност да вриједност магнетног момента буде врло слична вриједности у изолованим атомима. Такође се очекује и индуковање магнетних момената на атомима угљеника, бора и азота, у близини шупљина са адсорбованим атомима Ni, Co и Fe.

Циљ и методологија истраживања

Циљ истраживања је разумијевање основних физичких механизма одговорних за интеракцију атома метала и 2D материјала на којима се адсорбују, као и покушај да се примјеном теоријских метода да одговор на питање како јачина поменуте интеракције утиче на магнетне особине додатих атома. Додавање атома феромагнетних метала на 2D кристалима и спречавање њиховог груписања у веће структуре један је од начина израде 2D материјала са примјесама у облику једноатомских магнета.

У жижи изучавања биће истраживање утицаја металних примјеса на магнетне особине дводимензионалних кристала са одређеним дефектима. Дефекти настају приликом процеса производње датог материјала или се вјештачки стварају. Постоје различити

облици дефеката, а у овом раду разматраће се најједноставнији случај тачкастих структурних дефеката: једноатомских шупљина и двоатомских шупљина. Једноатомска шупљина се креира једноставним одстрањивањем једног угљениковог атома кристалне решетке у графену, односно одстрањивањем једног атома бора или азота у кристалној решеци бор-нитрида. У графену се двоатомска шупљина може креирати одстрањивањем два сусједна угљеникова атома. У односу на идеални графен, у овом случају се креирају два пентагона и један октагон. Енергија формирања оваквог дефекта је приближно једнака енергији формирања једноатомске шупљине, али је енергија формирања по атому мања у односу енергију формирања једноатомске шупљине чинећи тако двоатомске шупљине термодинамички фаворизованијим у поређењу са једноатомским шупљинама. У бор-нитриду двоатомске шупљине се креирају одстрањивањем по једног атома бора и азота, тј. уклањањем једног BN димера. Овај димер је основни градивни елемент h-BN структуре и због јаке B-N везе је један од најчешћих тачкастих дефеката у овом 2D материјалу.

Истраживање ће се спровести примјеном теорије функционал густине (DFT). DFT комбинује основне законе квантне механике и ефикасне нумеричке методе за добијање врло тачног описа електронских особина разматраних система, тако што се компликована вишечестична Шредингерова једначина замјењује једночестичним својственим проблемом у коме се електронско-електронска интеракција описује у апроксимацији средњег поља. У конкретним прорачунима особина наведених материјала биће коришћен програмски језик Phython.

Структура рада

Рад ће се оквирно састојати од 4 поглавља плус списак коришћене литературе. У уводу кратко ће бити описана тема истраживања, биће указано на њен значај и актуелност, као и главни разлози за њено истраживање. Биће дат кратак осврт на електронску и зонску теорију кристала. Такође биће кратко описао и свођење вишечестичне Шредингерове једначине на једноелектронски проблем како би могао бити описан метод функционала густине (DFT) и измјенско-корелациони функционал. Поред тога биће описани и софтверски пакети ASE и GPAW који су намјенски развијени за разматрање проблема овога типа. Други и трећи дио представљаће срж рада. У другом дијелу биће размотрена адсорпција феромагнетних атома (никла, кобалта и жељеза) са једноатомском и двоатомском шупљином. У трећем дијелу ће се разматрати адсорпција поменутих феромагнетних атома на другом дводимензионалном систему – хексагоналном бор-нитриду (h-BN). У овом дијелу ће се разматрати адсорпција на N-шупљинама, B-шупљинама и BN-шупљинама. У закључку биће дат кратак осврт на најважније резултате нумеричког израчунавања у другом и трећем дијелу.

Закључак

На основу претходно изложеног сматрамо да предложена тема магистарског рада кандидата Божицара Шошкића испуњава све услове предвиђене Правилима студирања на постдипломским сртудијама, прописане од стране Сената Универзитета Црне Горе.

Комисија предлаже Вијећу Природно-математичког факултета да кандидату Божидару Шошкићу одобри израду магистарског рада под називом "Магнетне примјесе у дводимензионалним материјалима са тачкастим структурним дефектима".

У Подгорици, 30. 10. 2018.

Комисија:

Борко Вујичић

1. Проф. др Борко Вујичић – ментор

Мирановић Предраг

2. Проф. др Предраг Мирановић – члан

3. Доц. др Гордана Јовановић – члан