

Универзитет Црне Горе
Природно-математички факултет
Вијећу Природно-математичког факултета

Crna Gora
UNIVERZITET CRNE GORE
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
Broj 3620
Podgorica, 23 NOV 2018 god.

Извјештај Комисије за оцјену магистарског рада Божидара Шошкића

Вијеће Природно-математичког факултета на сједници одржаној 31. 10. 2018. донијело је Олуку о именовању комисије за оцјену магистарског рада под називом *Магнетне примјесе у дводимензионалним материјалима са тачкастим структурним дефектима* специјалисте физике Божидара Шошкића.

Као чланови именоване комисије (др Борко Вујичић, редовни професор – ментор, др Предраг Мирановић, редовни професор – члан и др Гордана Јовановић, доцент – члан) након прегледа магистарског рада, у складу са чланом 29 став 1 Правила студирања на постдипломским студијама на Универзитету Црне Горе, Вијећу Природно-математичког факултета подносимо следећи

Извјештај

Текст рада достављеног на оцјену чине *Садржај* (2 стране) *Увод* (3 стране), три главе – *Кратак опис DFT метода и коришћеног компјутерског програма* (20 страна), *Адсорпција Ni, Co и Fe на графену* (12 страна), *Адсорпција Ni, Co и Fe на h-BN* (16 страна), *Закључак* (3 стране), *Литература* (3 стране). Рад садржи 32 слике и 6 табела. Структура рада испуњава све захтјеве прописане чланом 27 Правила студирања на постдипломским студијама

Постављени циљ

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 је 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 разматран је најједноставнији случај тачкастих структурних дефеката: једноатомске шупљине и двоатомске шупљине. Једноатомска шупљина се креира једноставним одстрањивањем једног угљениковог атома кристалне решетке у графену, односно одстрањивањем једног атома бора или азота у кристалној

решени 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.

Примијењене метода

Истраживање је спроведено примјеном теорије функционала 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 Шредингера једначина замјењује једночестичним својственим проблемом у коме се електронско-електронска интеракција описује у апроксимацији средњег поља. Рјешавање Шредингера једночестичне једначине за Кон-Шамов фиктивни систем подразумева познавање облика Кон-Шамовог ефективног потенцијала, односно познавање измјенско-корелационог потенцијала (у раду је коришћена апроксимација градијентног развоја – GGA). Густина измјенско-корелационе енергије у том случају зависи од електронске густине и градијента електронске густине. Овај потенцијал је коришћен јер је најпогоднији и најтачнији када опсијемо сложене системе нпр. молекул. За описивање система неопходно је ријешити Кон-Шамове једначине и у том циљу се користи самоусаглашени итеративни поступак. Због ефикасности прорачуна и једноставности рјешавања Кон-Шамових једначина креирају се одговарајуће алгоритамске петље. Коришћени софтверски пакети ASE и GPAW су управо намјењени и развијени за разматрање проблема овога типа, тј. за симулирање структуре материјала. Другим ријечима, овим поступком се испитују особине вјештачких структура у потрази за новим материјалима са пожељним физичким особинама. У конкретним прорачунима особина наведених материјала коришћени су програмски језици Python и C.

Добијени резултати

Као што је већ казано, у раду су конкретно анализирани магнетне и електронске особине феромагнетних метала Ni, Co и Fe додатих на дводимензионалне слојеве графена и хексагоналног бор-нитрида са најједноставним облицима структурних дефеката – тачкастим дефектима. На датим слојевима са једноатомским и двоатомским шупљинама додате магнетне примјесе са атомима наведених површина формирају јаке ковалентне везе. У односу на идеалне структуре, код слојева са тачкастим дефектима присутна је значајна промјена електронских стања у близини Фермијевог нивоа и адсорбовани атоми се јаче везују за овакве структуре. За сваки разматрани метал рачунате су вриједности магнетних момената и енергије веза. Добијени резултати су објашњени употребом теоријског модела хибридизације.

Прво је разматран систем који чине адсорбовани атоми Ni, Co и Fe и слој графена са једноатомском шупљином. Услјед изражене $3d-2p$ хибридизације дужине веза адсорбованих атома са најближим угљеницима су кратке ($1.76-1.79 \text{ \AA}$) што одговара великим вриједностима енергије веза за сва три типа феромагнетних атома и оне за Ni, Co и Fe износе $1.82, 2.35$ и 2.02 eV . Метали са парним бројем $3d$ електрона попуњавају метал-угљеник стања на такав начин да они постају немагнетни, док је магнетни момент атома Co једнак $1\mu_B$ јер посједује један неспарени $3d$ електрон.

Код графена са двоатомском шупљином, у односу на графен са једноатомском шупљином, дужине веза су веће ($1.87-1.92 \text{ \AA}$), што одговара мањим вриједностима енергије везе. Измјенско цијепање $3d$ електронских стања у случају Ni мало је и недовољно да компензује делокализацију стања насталих услед хибридизације, што за посљедицу има да је магнетни момент једнак нули. То није случај са Co и Fe, гдје је измјенско цијепање знатно веће и дати атоми задржавају ненулти магнетни момент. Гвожђе испољава необичне магнетне особине које су заправо резултат конкурентских ефеката хибридизације и електронско-електронске интеракције.

У случају h-BN са N-шупљином, наведени феромагнетни атоми формирају везе са атомима бора. Дужина везе је у интервалу $1.85-1.91 \text{ \AA}$ и број електронских стања који су локализовани на дефекту најмањи је од свих разматраних у овом раду, што одговара и најмањим вриједностима енергије везе. Метал-бор стања у случају Ni и Fe се попуњавају непарним бројем електрона, тако да један електрон остаје неспарен и пресудно утиче да овакви системи посједују укупни магнетни момент од $1\mu_B$. Пошто кобалт посједује непаран број $3d$ електрона, метал-бор хибридизована стања су попуњена на такав начин да систем испољава немагнетне особине.

У односу на структуру h-BN са N-шупљином, у случају B-шупљине дужине метал-азот везе ($1.76-1.79 \text{ \AA}$) мање су у односу на дужину метал-бор везе, што је у сагласности са добијеним већим вриједностима енергије везе метала са B-шупљином. Ова врста дефекта је најреактивнија врста дефеката који су истраживани у овом раду, што одговара и највећем броју електронских стања присутних око Фермијевог нивоа. Магнетне особине су исте као и у случају h-BN са N-шупљином.

h-BN са BN-шупљином је најмање реактивна врста дефеката који су истраживани у овом раду. Услјед слабе хибридизације $3d$ стања метала са $2p$ стањима атома N и B, сва три метала задржавају велике вриједности магнетних момената и оне су за Ni, Co и Fe, $1.77, 3.00$ и $4.00\mu_B$.

Закључци о реализованим истраживањима

Након прегледа магистарског рада кандидата Божицара Шошкића, анализе његовог текста и остварени резултата, сматрамо да је рад написан јасно, да је циљ рада реализован и да рад испуњава све услове научног рада предвиђене Правилима студирања на постдипломским студијама на Универзитету Црне Горе.

Чланови Комисије нису имали замјерки нису замјерки на коначну верзију рада изузев сзгестија да се исправи неколико уочених штампарских грешака.

Закључни став и предлог

На основу претходно написаног, позитивно оцјењујемо магистарски рад **Магнетне примјесе у дводимензионалним материјалима са тачкастим структурним дефектима** аутора специјалисте физике Божицара Шошкића.

Предлажемо Вијећу Природно-математичког факултета да рад прихвати и именује комисију за његову јавну усмену одбрану.

У Подгорици, 22. 11. 2018.

Комисија:

1. Проф. др Борко Вујичић – ментор

Борко Вујичић

2. Проф. др Предраг Мирановић –
члан

Мирановић Предраг

3. Доц. др Гордана Јовановић – члан

Гордана Јовановић