



**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: 2713/1

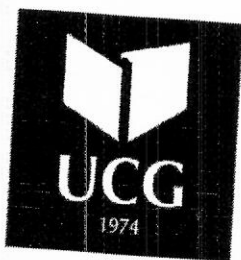
Datum: 24. 11. 2021

**Univerzitet Crne Gore
Odboru za doktorske studije**

U prilogu akta dostavljamo Odluku o usvajanju Izvještaja mentora prof. dr Predraga Miranovića i komentara prof. dr Željka Šljivančanina o napredovanju doktoranda Mr Božidara Šoškića, sa sjednice Vijeća od 19. 11. 2021. godine.

S poštovanjem,

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: 2713/2

Datum: 24.11.2021

Na osnovu člana 64 Statuta Univerziteta Crne Gore, na LXXII sjednici Vijeća održanoj 19.11.2021. godine, donijeta je

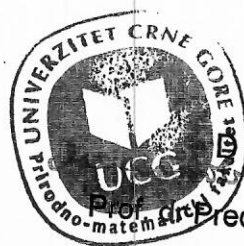
ODLUKA

I

Usvaja se godišnji Izvještaj mentora prof dr Predraga Miranovića o napredovanju MSc Božidara Šoškića, studenta doktorskih studija na Prirodno-matematičkom fakultetu - studijski program Fizika.

II

Odluka se dostavlja Centru za doktorske studije Univerziteta Crne Gore.



PROF. DR. PREDRAG MIRANOVIĆ

[Signature]
Predrag Miranović

GODIŠNJI IZVJEŠTAJ MENTORA O NAPREDOVANJU DOKTORANDA

Akademska godina za koju se podnosi izvještaj		2020/21	
OPŠTI PODACI O DOKTORANDU			
Titula, ime, ime roditelja, prezime	Mr Božidar (Nikola) Šoškić		
Fakultet	Prirodno - matematički fakultet		
Studijski program	Fizika		
Broj indeksa	2/18		
MENTOR/MENTORI			
Prvi mentor	Prof. dr Predrag Miranović, redovni profesor	Prirodno matematički fakultet, Univerzitet Crne Gore, Crna Gora	Fizika čvrstog stanja
Drugi mentor	Dr Željko Šljivančanin, naučni savetnik	Institut za nuklearne nauke „Vinča“, Srbija	Fizika čvrstog stanja
EVALUACIJA DOKTORANDA¹			
Koliko ste zadovoljni kvalitetom održanih susreta sa doktorandom?	<input type="checkbox"/> 1 <input type="checkbox"/> 2 <input type="checkbox"/> 3 <input type="checkbox"/> 4 <input checked="" type="checkbox"/> 5		
(Ako je prethodni odgovor „1“ ili „2“ dati obrazloženje i prijedloge za poboljšanje)			
Da li je definisan plan rada sa doktorandom?	<input checked="" type="checkbox"/> DA <input type="checkbox"/> NE		
Da li je doktorand ostvario napredak prema predviđenom planu rada?	<input checked="" type="checkbox"/> DA <input type="checkbox"/> NE		
(Ako je prethodni odgovor „ne“ dati obrazloženje i prijedloge za poboljšanje)			
Kvalitet napretka doktorandovog istraživačkog	<input type="checkbox"/> 1 <input type="checkbox"/> 2 <input type="checkbox"/> 3 <input type="checkbox"/> 4 <input checked="" type="checkbox"/> 5		

¹ Ocjene su: 1 – nedovoljan, 2 – dovoljan, 3 – dobar, 4 – vrlo dobar, 5 – odličan

rada u periodu između dva izvještaja je:

(Ako je prethodni odgovor „1“ ili „2“ dati obrazloženje i prijedloge za poboljšanje)

Dati ocjenu doktorandove spremnosti za konsultacije.	<input type="checkbox"/> 1	<input type="checkbox"/> 2	<input type="checkbox"/> 3	<input type="checkbox"/> 4	<input checked="" type="checkbox"/> 5
Dati ocjenu planiranja i izvršavanja godišnjih istraživačkih aktivnosti i stručnog usavršavanja doktoranda.	<input type="checkbox"/> 1	<input type="checkbox"/> 2	<input type="checkbox"/> 3	<input type="checkbox"/> 4	<input checked="" type="checkbox"/> 5
Dati ocjenu napretka u savladavanju metodologije naučno-istraživačkog rada.	<input type="checkbox"/> 1	<input type="checkbox"/> 2	<input type="checkbox"/> 3	<input type="checkbox"/> 4	<input checked="" type="checkbox"/> 5
Dati ocjenu o aktivnostima sprovedenim na pisanju i objavljivanju naučnih radova.	<input type="checkbox"/> 1	<input type="checkbox"/> 2	<input type="checkbox"/> 3	<input type="checkbox"/> 4	<input checked="" type="checkbox"/> 5
Dati ocjenu doktorandovog generalnog odnosa prema studijama.	<input type="checkbox"/> 1	<input type="checkbox"/> 2	<input type="checkbox"/> 3	<input type="checkbox"/> 4	<input checked="" type="checkbox"/> 5
Dati ocjenu ukupnog kvaliteta doktorandovog rada.	<input type="checkbox"/> 1	<input type="checkbox"/> 2	<input type="checkbox"/> 3	<input type="checkbox"/> 4	<input checked="" type="checkbox"/> 5

(Ako je prethodni odgovor „1“ ili „2“ dati obrazloženje i prijedloge za poboljšanje)

SAGLASNOST ZA NASTAVAK STUDIJA

Može li doktorand nastaviti studije?

- Da
 Da, uz određene uslove
 Ne

(Ako je prethodno dat odgovor pod „b“ ili „c“ dati obrazloženje i prijedloge za poboljšanje)

Napomene

(Popuniti po potrebi)

IZJAVA MENTORA

Tokom druge godine istraživanja na ovom projektu, doktorand Božidar Šoškić je nastavio sa ispitivanjima magnetnih osobina jednoatomskih lanaca gvožđa (Fe) formiranih na dvodimenzionalnoj strukturi bora (borofen), koja je deponovana na površinu srebra Ag(111) (detaljno objašnjeno u izvještaju za 1 godinu). Razmatrani 2D magnet je zatim uspješno modelovao primjenom Izingovog (Ising) i Hajzenbergovog (Heisenberg) modela, za sistem

jednoatomskih lanaca Fe iznad i ispod borofena, a zatim je odredio i konstante izmjenke interakcije na osnovu razlika u energijama različitih spinskih konfiguracija, dobijenih primjenom teorije funkcionala gustine (eng. Density Functional Theory – DFT). Kako je DFT zapravo teorija osnovnog stanja elektronskog sistema, pri razmatranju uticaja temperature na magnetne osobine 2D materijala, neophodno je bilo da se DFT rezultati kombinuju sa drugim teorijskim metodama. Jedan od najčešće korišćenih je Monte Karlo (Monte Carlo) metod. Generalno, riječ je o numeričkoj stohastičkoj metodi koja se zasniva na računanju raspodjela vjerovatnoća proizvoljnim izborom brojeva i ponavljanjem slučajnih pokušaja kako bi se, u njegovom slučaju, odredile termodinamičke osobine različitih sistema koje nijesu unaprijed poznate, zadavanjem početnih parametara i određenih ograničenja. Tako je doktorand Božidar Šoškić, dobijene DFT rezultate, koji se odnose na određivanje parametara izmjenke interakcije, a koje je uspješno modelovao Izingovim i Hajzenbergovim modelom, iskoristio kao ulazne (input) parametre za Monte Karlo (u daljem tekstu - MK) simulacije. Za navedene MK proračune je koristio *Metropolis* algoritam, koji je podrazumijevao:

1. pripremanje inicijalne konfiguracije N spinova;
2. „Pretvaranje“ 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 $\exp(-dE/t)$, tako da zadovoljavamo uslove balansa i postizanja krajnjeg ravnotežnog stanja;
5. Postupak se ponavlja izabrani broj puta.

Na ovaj način je MK metod koristio za simuliranje određenih fizičkih osobina sistema, kao što je spontana magnetizacija, specifična toplota, magnetna susceptibilnost i ukupna energija sistema. 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 je zbog cjelokupne analize upotrijebio oba modela. Glavni dio ispitivanja se odnosio na određivanje kritične temperature faznog prelaza (iz paramagnetnog u feromagnetno uređenje spinskih magnetnih momenata) koje je sproveo uz pomoć metoda koji prati promjene veličina koje mjeri sa odabirom različitih veličina ćelije L (eng. *method of finite-size lattice scaling*). U slučaju 2D Hajzenbergovog modela, morao je da uradi proračune koji se odnose na određivanje anizotropne magnetne energije, jer je ovaj član jako bitan za održavanje dugodometnog magnetnog uređenja u sistemu. Nakon svih sprovedenih proračuna i uspješne interpretacije rezultata, zajedno sa svojim komentorom dr Željkom Šljivančaninom, sa Instituta za nuklearne nauke „Vinča“, Univerzitet u Beogradu i dr Srđanom Stavrićem, sa Univerziteta u Trstu, Italija, uspješno je objavio dio rezultata istraživanja u naučnom časopisu *Physical Review Materials*:

- **Božidar N. Šoškić, Srđan Stavrić, and Željko Šljivančanin, "Ab-initio and Monte Carlo study of Fe-based two-dimensional magnets at borophene supported by Ag (111) surface", *Phys. Rev. Materials* 5, 074001 (2021).**

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.5.074001>

Nakon prihvatanja naučnog rada, doktorand Božidar Šoškić se posvetio pripremi odbrane polaznih istraživanja, a imenovana komisija fakulteta je sa **pozitivnom** ocjenom prihvatila njegov izvještaj nakon odbrane.

Takođe, učestvovao je i na nekoliko međunarodnih programa i škola obuke za kompjutersko modelovanje materijala:

- All electron DFT with **Fleur** - a Hands-on Tutorial, Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire (22.04.2021. - 26.04.2021.), Jülich Forschungszentrum;
- MaX School on Advanced Materials and Molecular Modelling with **Quantum ESPRESSO**, ICTP - The Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics (17.05.2021. - 28.05.2021.), Italija;
- **GPAW 2021: Users and Developers Meeting**, Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire (01.06.2021. - 04.06.2021.), Italija.

Nakon završenih obuka, objave naučnog rada, kao i odbrane polaznih istraživanja, kandidat je nastavio sa ispitivanjem superprovodljivih osobina 2D struktura bora sa komentrom dr Željkom Šljivančaninom, kao i sa njegovim mentorom prof. dr Predragom Miranovićem, sa kojim planira da na najbolji mogući način fenomenološki opiše ekperimentalne veličine u superprovodljivim 2D materijalima bora. Naime, posebnu pažnju naučne javnosti je, u posljednje tri godine, privukla 2D heksagonalna struktura bora (sačasta struktura) koja je sastavljena od samo jednog atoma - atoma bora. Data struktura je uspješno sintetizovana koristeći aluminijum Al(111) kao supstrat i teorijski proračuni su potvrdili veliku energetsku stabilnost ove neobične 2D strukture. Primijećeno je da se približno jedan elektron predaje jednom atomu bora od strane supstrata Al(111), dok u slučaju Ag(111) supstrata taj transfer elektrona je zanemarljiv. Postojanje ovakvog 2D alotropa bora je od velikog značaja za razumijevanje hemijskih osobina 2D struktura bora i ova struktura može da posluži kao idealna platforma za proizvodnju materijala sa neobičnim fizičkim osobinama (npr. pojava Dirakovih stanja) - kontrolisanje superprovodljivih osobina. Kako se kandidat bavio ispitivanjem ekperimentalno dobijenih faza 2D bora (β_{12} i χ_3) na srebru, njegove prethodno dobijene rezultate može da spoji sa novim u kojima planira da prethodno navedene dvije faze i 2D heksagonalnu strukturu bora vještački dopira elektronima. Cilj novih istraživanja je da se ispita stabilnost samih sistema, kao i za koje vrijednosti broja dopiranih elektrona po atomu bora je heksagonalna struktura stabilnija u odnosu na β_{12} i χ_3 faze. Na ovaj način će ispitati kako efekat dopiranja struktura različitim brojem elektrona utiče na njihovu stabilnost, da bi zatim primjenom perturbacione teorije funkcionala gustine (eng. Density Functional Perturbation Theory – DFPT), odredio konstantu elektron-fonon sprege i kritičnu temperaturu. Koristeći Eliashbergovu (Eliashberg) teoriju, koja je povezana sa DFPT, moguće je odrediti vrijednost superprovodljivog procjepa, kao i odličnu procjenu kritične temperature nekog superprovodljivog materijala preko Makmilanove (McMillan) formule. Takođe, određeni DFT rezultati će se koristiti kao ulazni (input) parametri za druge teorijske modele kojima će pokušati da u potpunosti objasni fenomen superprovodljivosti u 2D

strukturama bora.

Dakle, generalno govoreći dopiranjem želi da objasni kakva je stabilnost sistema, kolika je promjena konstante elektron-fonon sprege λ , kako je moguće da podešava i kontroliše datu konstantu i kakav to uticaj ima na vrijednosti kritičnih temperatura različitih faza 2D bora. Očekuje se da će data istraživanja biti i od velike koristi za dalji razvoj superprovodljivih uređaja, kao i za naučni razvoj teorije o 2D materijalima.

U međuvremenu, ostvario je kontakt sa grupom dr Milorada Miloševića sa Univerziteta u Antverpenu, Belgija, sa kojima intenzivno radi na ispitivanju superprovodljivih efekata 2D struktura bora i u procesu je učenja EPW (eng. Electron-phonon Wannier) koda, koji je povezan sa softverskim programom Quantum ESPRESSO, koji će mu pomoći da lakše ispituje superprovodljive osobine istih. Trenutno je saradnja ostvarena onajn putem, ali kandidat je u toku proceduralne prijave boravka na Univerzitetu u Antverpenu, a ako ne bude drugih neočekivanih okolnosti, doktorand bi boravio na pomenutom Univerzitetu od februara 2022. godine, na šest mjeseci, uz pomoć stipendije Ministarstva nauke Crne Gore. Boravak je ranije bio spriječen nepovoljnom epidemiološkom situacijom izazvane Korona virusom, ali sada su se stekli potrebni uslovi da doktorand boravi na pomenutom Univerzitetu, što su nam i zvanično potvrdili njihovi rukovodioci. Ovaj boravak će kandidatu biti od velikog značaja, jer će spojiti svoja nova istraživanja sa prethodnim istraživanjima koja je sproveo u saradnji sa Institutom za nuklearne nauke „Vinča“ u Beogradu, kako bi u potpunosti ostvario svoje planove na izradi doktorske disertacije. Takođe, planirano je da kandidat tokom boravka nauči još nekoliko softverskih programa koji se odnose na ispitivanje superprovodljivih efekata i da objavi svoje dobijene rezultate u bar još jednom naučnom časopisu sa SCI liste. Rad na Univerzitetu u Antverpenu će biti idelana prilika da doktorand skupi dodatno iskustvo u pogledu rada u velikim naučno-istraživačkim grupama.

Nakon boravka, planirano je da kandidat svoja cjelokupna istraživanja sistematizuje i prezentuje na međunarodnoj konferenciji u Japanu, kako je planirano preko stipendije Ministarstva nauke Crne Gore, ali ukoliko epidemiološka situacija bude spriječila održavanje konferencije, kandidatu ćemo pokušati da obezbijedimo učešće na jednako kvalitetnoj naučnoj konferenciji u nekoj drugoj državi.

Kandidat je već svoje ostvarene rezultate prikazao preko nekoliko onlajn škola (učesnicima obuke), a medijski je njegov dosadašnji rad dobro ispraćen i u Crnoj Gori. Linkovi:

- <https://www.ucg.ac.me/objava/blog/100/objava/125447-svijet-fizike-i-saradnja-sa-medunarodnim-institutima-na-2d-kristalnim-strukturama-bora>
- <https://me.ekapija.com/news/3453917/istrazivanja-2d-kristala-doprinosu-razvoju-novih-magnetnih-vjstackih-struktura-naucni-podstrek-za>
- <https://www.portalanalitika.me/clanak/svijet-fizike-i-saradnja-sa-medunarodnim-institutima-na-2d-kristalnim-strukturama-bora>
- <https://m.cdm.me/drustvo/svijet-fizike-i-saradnja-sa-medunarodnim-institutima-na->

2d-kristalnim-strukturama-bora/

Nakon boravka u Belgiji, kao i učešća na naučnoj konferenciji preko stipendije, kandidat će se posvetiti izradi doktorske disertacije, kako je i planirano.

U Podgorici,

17.11.2021. god.

Prof. dr Predrag Miranović

Miranović Predrag

Dr Željko Šljivančanin

Šljivančanin Željko