НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ УНИВЕРЗИТЕТА У БЕОГРАДУ
ФИЗИЧКОГ ФАКУЛТЕТА

На XI седници Наставно-научног Већа Физичког факултета Универзитета у Београду, одржаној 21. новембра 2018. године, одређени смо за чланове Комисије за оцену испуњености услова и оправданости предложене теме за израду докторске дисертације кандидата Срђана Ставрића, под насловом:

First-principles study of the structural and electronic properties of metals adsorbed on two-dimensional materials

односно на српском језику:

Ab initio *истраживање структурних и електронских особина метала адсорбованих на дводимензионалним материјалима*

Након прегледа достављеног материјала подносимо Наставно-научном већу Физичког факултета следећи:

И З В Е Ш Т А Ј

1. Основни биографски подаци

Срђан Ставрић (у даљем тексту: кандидат) рођен је 31.03.1990. године у Зајечару. Гимназију у Зајечару завршио је 2009. године са одличним успехом и дипломом *Вук Караџић*, као најбољи ученик у генерацији.

Физички факултет Универзитета у Београду, смер Теоријска и експериментална физика, уписује 2009. године. Дипломирао је 2013. године са просечном оценом 9,92 и исте године је уписао мастер студије Физичког факултета, смер Теоријска и експериментална физика, које завршава 2014. године са просечном оценом 10,00. Одбранио је мастер рад *Испитивање адсорпције метала на графену помоћу теорије функционала густине* из области рачунарске физике кондензованог стања под менторством др Жељка Шљиванчанина, научног саветника Института за нуклеарне науке *Винч*а (у даљем тексту: ИНН *Винча*). За наведени мастер рад кандидату је додељена награда Физичког факултета *Проф. др Љубомир Ћирковић* за академску 2014/2015. годину.

Докторске студије на Физичком факултету, ужа научна област Физика кондензоване материје и статистичка физика, уписује 2014. године, под менторством др Жељка Шљиванчанина. На докторским студијама је положио све испите предвиђене планом и програмом.

Кандидат је био запослен на Рударско-геолошком факултету као асистент на катедри за физику у периоду 2014-2015. године. Од 2015. године запослен је у ИНН *Винча* као истраживач-сарадник, у Лабораторији за теоријску физику и физику кондензоване материје (020). Ангажован је на пројекту Министарства просвете, науке и технолошког развоја под називом *Електронске, транспортне и оптичке особине нанофазних материјала*, евиденциони број пројекта ОИ171033. На Физичком факултету држи рачунске вежбе из Теорије кондензованог стања као и лабораторијске вежбе из Механике и Термодинамике.

2. Научна активност кандидата

Кандидат је коаутор 4 рада у угледним међународним часописима М21 категорије из области физике кондензованог стања и физике материјала. Бави се компјутерском физиком кондензованог стања, а предмет његовог научног истраживања су дводимензионални материјали, њихове хетероструктуре и наноструктуре које на овим материјалима формирају адсорбовани метали. За опис физичких својстава ових структура користи нумеричке методе развијене око теорије функционала густине.

3. Списак публикација

Досадашње публикације кандидата које се тичу предложене теме:

1. S. Stavrić, Z. S. Popović, Ž. Šljivančanin,
   "Understanding trends in lithium binding at two-dimensional materials",
   Phys. Rev. Materials ***2***, 114007, (2018). [ISSN 2475-9953, IF -]

2. S. Stavrić, M. Belić, Ž. Šljivančanin,
   "Planar versus three-dimensional growth of metal nanostructures at graphene",
   Carbon ***96*** (2016), 216-222. [ISSN 0008-6223, IF 7.082/2017]

Поред наведених публикација, кандидат је коаутор и неколико публикација посредно повезаних са предложеном темом доктората:

3. A. Singha, F. Donati, F. D. Natterer, C. Wäckerlin, S. Stavrić, Z. S. Popović, Ž. Šljivančanin, F. Patthey, and H. Brune,
   "Spin excitations in a 4f-3d heterodimer on MgO",
   рад прихваћен у часопису *Phys. Rev. Lett.*, [ISSN 0031-9007, IF 8.839/2017]

4. E. Fernandes, F. Donati, F. Patthey, S. Stavrić, Ž. Šljivančanin, and H. Brune,
   "Adsorption sites of individual metal atoms on ultrathin MgO(100) films",
   Phys. Rev. B **96**, 045419, (2017). [ISSN 1098-0121, IF 3.813/2017]

4. Предмет проучавања, циљ предложене тезе и методологија рада

Предложена докторска дисертација припада области компјутерске физике кондензоване материје, а има за циљ да истражи и опише физичка својства адсорбованих наноструктура метала на бројном скупу (квази)дводимензионалних материјала (у даљем тексту 2Д материјала). 2Д материјали су састављени од атома распоређених у једној или неколико блиских, паралелних равни. До данас је експериментално изоловано више од стотину 2Д материјала врло различитих структурних и електронских својстава. Њихова потенцијална примена у пост-силицијумској полупроводничкој технологији, соларним ћелијама, као и новим батеријама са унапређеним карактеристикама, чини их веома актуелним предметом проучавања. За поменуте технолошке примене ових материјала важно је познавати физичке особине структура које они граде са металима, односно структура које атоми метала образују када су адсорбовани на 2Д кристалима. Ова докторска теза ће настојати да систематски опише управо ова својства.

Методологија коришћена у овом раду је заснована на теорији функционала густине (енглески: *density functional theory - DFT*) и омогућава да се истраживање компликованих многочестичних система интерагујућих електрона сведе на прорачуне над фиктивним системима неинтерагујућих честица у ефективном спољашњем потенцијалу. На тај начин се

проблем знатно поједностављује, а нумеричким решавањем једначина које одговарају фиктивном систему добијају се физичке величине које описују електронску структуру реалних система. Предност наведеног метода у односу на друге, њему сличне, јесте то што има знатно повољнији однос нумеричких захтева и тачности добијених резултата, због чега данас представља најчешће коришћени метод за прорачуне електронске структуре различитих материјала.

Посебна пажња у дисертацији биће посвећена графену, угљеничном материјалу чија је експериментална изолација подстакла развој физике 2Д материјала. Са становишта примене графена у новим опто-електронским компонентама од посебне важности су наноструктуре метала на графену. Први део предложене тезе настојаће да опише структурна и електронска својства наноструктура које атоми метала образују на графену – од појединачних атома до читавих једнослојева. Кандидат планира да ово оствари одабиром погодних представника алкалних, земноалкалних и прелазних метала и кроз дате примере опише утицај метал-метал и метал-графен интеракције на облик образованих наноструктура. Тиме би се потпуније описали случајеви у којима атоми неће образовати кластере на графену, као и они у којима ће атоми метала тежити формирању компактних 2Д односно 3Д структура.

Поред графена, предложена тема истраживања обухвата и друге 2Д кристале, као што су фосфорен, силикан, германан, флуоризовани графен, карбиди елемената XIV групе, MX-ени, а такође и представнике бројне породице једнослојних оксида и дихалкогенида прелазних метала. Важно питање са становишта нових научних истраживања на пољу литијум-јонских батерија јесте како се понаша литијум након адсорпције на овим 2Д кристалима и како овај метал мења њихова структурна, електронска и магнетна својства. Јачина везе литијума, као и покретљивост његових јона на површини, веома су важне карактеристике које могу да предвиде погодност датог материјала за употребу у производњи литијум-јонских батерија. Кандидат ће у оквиру предложене теме настојати да систематски опише адсорпцију литијума на бројном скупу 2Д кристала и образложи како се јачина везе литијума може предвидети на основу основних електронских особина изолованих 2Д кристала.

5. Закључак

На основу изложеног, комисија закључује да кандидат Срђан Ставрић испуњава Законом о Универзитету и Статутом Физичког факултета прописане услове за израду докторске дисертације. Предложена тема је актуелна и научно оправдана, циљ дисертације и методи рада су јасно дефинисани, а на основу увида у досадашње резултате кандидата могу се очекивати нови значајни резултати. Због тога комисија предлаже Наставно-научном већу Физичког факултета Универзитета у Београду да кандидату Срђану Ставрићу одобри израду докторске дисертације на енглеском језику под називом *First-principles study of the structural and electronic properties of metals adsorbed on two-dimensional materials* (на српском: Ab initio *истраживање структурних и електронских особина метала адсорбованих на дводимензионалним материјалима*). За руководиоца докторске дисертације предлажемо др Жељка Шљиванчанина, научног саветника ИНН *Винча*.

У Београду, __.12.2018.

Чланови комисије:

проф. др Иванка Милошевић
редовни професор
Физички факултет, Универзитет у Београду

проф. др Татјана Вуковић
ванредни професор
Физички факултет, Универзитет у Београду

др Жељко Шљиванчанин,
научни саветник
ИНН *Винча*, Универзитет у Београду