

Образац 3.

Факултет ТЕХНОЛОШКО-
МЕТАЛУРШКИ

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ

35/90

Веће научних области техничких наука

(Број захтева)

(Назив већа научне области коме се захтев
упућује)

29. 4. 2025.

(Датум)

ЗАХТЕВ

за давање сагласности на одлуку о прихватању теме докторске дисертације
и о одређивању ментора

Молимо да, сходно чл. 48 ст. 5 тач. 3) Статута Универзитета у Београду („Гласник Универзитета“ бр. 201/2018, 207/2019, 213/2020, 214/2020, 217/2020, 230/21, 232/22, 233/22 и 236/22), дате сагласност на одлуку о прихватању теме докторске дисертације:

Развој и дизајн нових легура титана применом напредних рачунарских метода

(Development and Design of New Titanium Alloys Using Advanced Computational Methods)

(пун назив предложене теме докторске дисертације)

НАУЧНА ОБЛАСТ Металуршко инжењерство

ПОДАЦИ О КАНДИДАТУ:

1. Име, име једног од родитеља и презиме кандидата:

Гордана, Драган, Марковић

2. Претходно образовање (назив и седиште факултета, студијски програм):

Универзитет у Београду,

Технолошко-металуршки факултет, Металуршко инжењерство

3. Година завршетка
претходног нивоа студија: 2022.

4. Година уписа на докторске студије: 2022.

5. Назив студијског програма
докторских студија:

Металуршко инжењерство

6. Датум подношења пријаве
теме докторске дисертације:

12. 3. 2025.

ПОДАЦИ О МЕНТОРУ:

за кандидата **Гордана Марковић**

Име и презиме ментора: **др Васо Манојловића**

Звање: ванредни професор Универзитета у Београду, Технолошко-металуршки факултет

Списак радова који квалификују ментора за вођење докторске дисертације:

1. Manojlović, Vaso, Željko Kamberović, Marija Korać, and Milan Dotlić. "Machine learning analysis of electric arc furnace process for the evaluation of energy efficiency parameters." Applied Energy 307 (2022): 118209. ISSN: 0306-2619, IF(2022): 11.2, <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2021.118209>
2. Popović, Andjelka, Vaso Manojlović, Borivoje Adnadjević, Jelena Petrović, Željko Kamberović, and Milisav Ranitović. "Recovery of rare-earth elements from printed circuit boards by vacuum pyrolysis and multiple electrostatic separation." Processes 10, no. 6 (2022): 1152. ISSN: 2227-9717, IF(2022): 3.5, <https://doi.org/10.3390/pr10061152>
3. Ivanović, Jelena B., Vaso D. Manojlović, Nataša M. Gajić, Nigel T. Phuthi, Jelena P. Zakonović, Miroslav D. Sokić, and Željko J. Kamberović. "Exergy analysis and machine learning for enhanced EAF steel recycling." Thermal Science 00 (2024): 258-258. ISSN: 0354-9836, IF (2023): 1.1, <https://doi.org/10.2298/TSCI240607258I>
4. Milojkov, Dušan V., Miroslav Sokić, Ana Radosavljević-Mihajlović, Vojislav Dj Stanić, Vaso Manojlović, Dragosav R. Mutavdžić, and Marija Milanović. "Influence of Pr³⁺ and CO₃²⁻ ions coupled substitution on structural, optical and antibacterial properties of fluorapatite nanopowders obtained by precipitation." Metals 11, no. 9 (2021): 1384. ISSN: 2075-4701, IF (2021): 2.9, <https://doi.org/10.3390/met11091384>
5. Manojlovic, Vaso, Željko Kamberovic, Milorad Gavrilovski, Miroslav Sokic, and Marija Korac. "Combustion of metallurgical wastes using secondary aluminum foils." Combustion Science and Technology 189, no. 6 (2017): 1072-1089. ISSN: 0010-2202, IF(2017): 1.132, <https://doi.org/10.1080/00102202.2016.1274310>

ДЕКАНКА ФАКУЛТЕТА

Проф. др Мирјана Кијевчанин

ПОДАЦИ О МЕНТОРУ 2:

за кандидата **Гордана Марковић**

Име и презиме ментора: **др Јована Ружић**

Звање: виши научни сарадник, Институт за нуклеарне науке „Винча“, Институт од националног значаја за Републику Србију

Списак радова који квалификују ментора за вођење докторске дисертације:

1. Ruzic, Jovana, Satoshi Emura, Xin Ji, and Ikumu Watanabe. "Mo segregation and distribution in Ti–Mo alloy investigated using nanoindentation." Materials Science and Engineering: A 718 (2018): 48-55. ISSN: 0921-5093, IF (2018): 4.081, <https://doi.org/10.1016/j.msea.2018.01.098>
2. Ruzic, Jovana, Ikumu Watanabe, Kenta Goto, and Takahito Ohmura. "Nano-indentation measurement for heat resistant alloys at elevated temperatures in inert atmosphere." Materials transactions 60, no. 8 (2019): 1411-1415. ISSN: 1345-9678, IF (2019): 0.731, <https://doi.org/10.2320/matertrans.MD201909>
3. Dimčić, Biljana, Jelena Stašić, Jovana Ružić, and Dušan Božić. "Effect of synthesis parameters on structural and mechanical properties of Ti3Al–Nb–Mo intermetallic compound obtained by powder metallurgy techniques." transactions of nonferrous metals society of china 27, no. 3 (2017): 527-537. ISSN: 1003-6326, IF (2019): 1.795, [https://doi.org/10.1016/S1003-6326\(17\)60059-1](https://doi.org/10.1016/S1003-6326(17)60059-1)
4. Ruzic, Jovana, Kenta Goto, Ikumu Watanabe, Toshio Osada, Liberty Wu, and Takahito Ohmura. "Temperature-dependent deformation behavior of γ and γ' single-phase nickel-based superalloys." Materials Science and Engineering: A 818 (2021): 141439. ISSN: 0921-5093, IF (2021): 6.04, <https://doi.org/10.1016/j.msea.2021.141439>
5. Bobić, Biljana, Aleksandar Vencl, Jovana Ružić, Ilija Bobić, and Zvonko Damnjanović. "Microstructural and basic mechanical characteristics of ZA27 alloy-based nanocomposites synthesized by mechanical milling and compocasting." Journal of Composite Materials 53, no. 15 (2019): 2033-2046. ISSN: 0021-9983, IF (2019): 1.972, <https://doi.org/10.1177/0021998318817876>

ДЕКАНКА ФАКУЛТЕТА

Проф. др Мирјана Кијевчанин

Обавештавамо вас да је Наставно-научно веће

(назив надлежног тела факултета)

на седници одржаној 24. 4. 2025. године размотрило предложену тему и закључило да је

тема подобна за израду докторске дисертације јер садржи оригиналну идеју и да је од
значаја за развој науке, примену њених резултата, односно развој научне мисли уопште.

- Прилог 1. Одлука Наставно-научног већа о прихватању теме и одређивању ментора
2. Извештај Комисије о оцени научне заснованости теме докторске дисертације

**Напомена: Факултет доставља Универзитету захтев са прилозима у електронској форми и
у једном писаном примерку за архиву Универзитета**

ДП

На основу чл. 40. став 3. Закона о високом образовању, чл. 112. став 3. Статута Универзитета у Београду, чл. 88. став 3. Статута ТМФ-а и чл. 33. Правилника о докторским студијама ТМФ-а на седници Наставно-научног већа Технолошко-металуршког факултета од 24. 4. 2025. године, донета је

О Д Л У К А

о прихватању Реферата Комисије за оцену подобности теме и кандидата
за израду докторске дисертације

Прихвата се Реферат Комисије за оцену подобности теме и кандидата и одобрава израда докторске дисертације **Гордане Марковић**, број индекса 2022/4012, под називом: „**Развој и дизајн нових легура титана применом напредних рачунарских метода (Development and Design of New Titanium Alloys Using Advanced Computational Methods)**“.

Одлуку о давању сагласности на предлог теме докторске дисертације доноси Универзитет у Београду.

За менторе се одређују др Васо Манојловић, ванредни професор Универзитета у Београду, Технолошко-металуршки факултет и др Јована Ружић, виши научни сарадник Универзитета у Београду, Институт за нуклеарне науке „Винча“, Институт од националног значаја за Републику Србију.

Одлуку доставити: Универзитету у Београду, кандидату, менторима, Служби за наставно студентске послове и архиви Факултета.

Д Е К А Н К А

Проф. др Мирјана Кијевчанин

НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ

Предмет: Подобност теме и кандидаткиње Гордане Д. Марковић, мастер инжењера металургије, за израду докторске дисертације

Одлуком 2025 - 35/40 бр. од 20.3.2025 године, именовани смо за чланове Комисије за оцену подобности теме и кандидаткиње Гордане Д. Марковић, мастер. инж. мет., за израду докторске дисертације и научне заснованости теме „Развој и дизајн нових легура титана применом напредних рачунарских метода“ (Development and Design of New Titanium Alloys Using Advanced Computational Methods).

На основу материјала приложеног уз Захтев кандидата, Комисија подноси следећи

РЕФЕРАТ

1. Подаци о кандидату

1.1. Биографски подаци

Гордана Д. Марковић рођена је 21. априла 1997. године у Београду. Основну школу, под називом „Милан Хаџић“ завршила је у Војки, док је је Гимназију „Бранко Радичевић“, завршила у Старој Пазови. Основне академске студије на студијском програму Инжењерство материјала уписала је школске 2016/17. године на Технолошко-металуршком факултету Универзитета у Београду. Студије је завршила 30. септембра 2021. године са просечном оценом 8,75. Завршни рад под насловом „Утицај степена деформације на величину кристалисаних зрна у Al-Mg легурама за ауто индустрију“ одбранила је са оценом 10, под менторством проф. др Миљане Поповић.

Мастер академске студије на студијском програму металуршко инжењерство Технолошко-металуршког факултета завршила је 30. септембра 2022. године са просечном оценом 10,00, одбравивши рад „Предвиђање механичких својстава биокомпатибилних легура титана применом машинског учења“, под менторством проф. др Васа Манојловића. Докторске академске студије уписала је школске 2022/23. године на студијском програму Металуршко инжењерство, на Технолошко-металуршком факултету под менторством проф. др Васа Манојловића.

Од новембра 2022. године запослена је као истраживач-приправник у Институту за технологију нуклеарних и других минералних сировина у Београду. Њена

научноистраживачка делатност усмерена је на примену савремених рачунарских метода, као што су машинско учење, теорија функционале густине (DFT) и молекулска динамика (MD) у дизајну и карактеризацији легура титана побољшаних механичких својстава и биокомпатибилности.

Кандидаткиња активно учествује у међународним истраживачким пројектима и чланица је три COST акције:

- CA22143 – *European Materials Informatics Network* (EuMINE)
- CA21121 – *European Network for the Mechanics of Matter at the Nano-Scale* (MecaNano)
- CA22123 – *European Materials Acceleration Center for Energy* (EU-MACE)

Од новембра 2024. године, чланица је тима за моделовање у оквиру истраживачког пројекта *Innovative Structural Materials for Fission and Fusion*, који се спроводи у сарадњи са организацијом *Innumat*, под вођством проф. др Хавијера Домингеса.

У септембру 2024. године учествовала је на летњој школи *EuMINE 1st Training School* у Београду, посвећеној примени дигиталних алата и вештачке интелигенције у материјалној информатици и развоју напредних материјала.

Гордана Марковић је чланица организационог тима међународне конференције *6th Metallurgical & Materials Engineering Congress of South-East Europe (MMESEE 2025)*, као и активна чланица Савеза металурга Србије.

У истраживачком раду активно користи симулационе пакете VASP и LAMMPS, а одлично се служи програмским језицима и софтверским алатима као што је Python и Microsoft Office пакетом (Word, Excel). До сада је објавила три научна рада у релевантним часописима и осам радова и саопштења на научним конференцијама.

Течно говори енглески језик, а поседује и сертификат нивоа B1 из шпанског језика.

1.2. Стечено научноистраживачко искуство

Гордана Д. Марковић је школске 2022/23. године уписала докторске академске студије на Технолошко-металуршком факултету Универзитета у Београду на студијском програму Металуршко инжењерство. Положила је све испите предвиђене планом и програмом докторских академских студија са просечном оценом 10,00, као и завршни испит са темом „Дизајн, процесирање и карактеризација биокомпатибилних легура титана“.

Положени испити на докторским студијама:

Ред. бр.	Шифра	Назив предмета	Оцена	ЕСПБ
1.	22ДТЧС	Термодинамика чврстог стања	10 (десет)	6
2.	22Д16П	Структура и својства металних материјала	10 (десет)	5
3.	22ДМ2	Одабрана поглавља нумеричке анализе	10 (десет)	6
4.	22Д14П	Кинетика металуршких процеса	10 (десет)	5
5.	22Д24	Металургија праха	10 (десет)	6
6.	22Д26	Наноструктурни метални материјали	10 (десет)	5
7.	22Д37	Увод у електронску микроскопију	10 (десет)	6
8.	22Д34	Употреба рачунара у симулацији ливења и дизајнирању одливака и уливних система	10 (десет)	6
9.	22Д38	Грешке у кристалној структури	10 (десет)	5
10.	22Д3И	Завршни испит	10 (десет)	30

Одрађене обавезе:

Ред. бр.	Назив обавезе	ЕСПБ
1.	Докторска дисертација – научно истраживачки рад 1	5
2.	Докторска дисертација – научно истраживачки рад 2	5
3.	Докторска дисертација – научно истраживачки рад 3	24
4.	Израда докторске дисертације	6

Из досадашњег научноистраживачког рада Гордане Д. Марковић, проистекли су следећи резултати:

(M21) Рад у врхунском међународном часопису

1. Marković, G., Manojlović, V., Ružić, J., & Sokić, M. (2023). *Predicting Low-Modulus Biocompatible Titanium Alloys Using Machine Learning*. *Materials*, 16(19), 6355. <https://doi.org/10.3390/ma16196355> (IF = 3.1, ISSN: 1996-1944)

(M23) Рад у међународном часопису

2. Marković, G., Ružić, J., Sokić, M., Milojkov, D., & Manojlović, V. (2024). *Prediction of elastic modulus, yield strength, and tensile strength in biocompatible titanium alloys*. *Journal of Mining and Metallurgy, Section B: Metallurgy*, 60(2), 273–282. <https://doi.org/10.2298/JMMB230926010M> (IF = 0.9, ISSN: 1450-5339)

(M33) Саопштење са међународног скупа штампано у целини

1. Marković, G., Manojlović, V., Sokić, M., Ružić, J., Milojkov, D., Patarić, A.: *Predicting the modulus of elasticity of biocompatible titanium alloys using machine learning*, *Proceedings of the 5th Metallurgical & Materials Engineering Congress of South-East Europe*, Belgrade, 2023, pp. 154–158.

2. Patarić, A., Marković, G., Đorđević, N., Mihajlović, S., Mihailović, M.: *Microstructure assessment of Co alloy intended for dentistry*, Proceedings of the 5th Metallurgical & Materials Engineering Congress of South-East Europe, Belgrade, 2023, pp. 221–225.

3. Marković, G., Manojlović, V., Sokić, M., Ružić, J., Milojkov, D.: *Designing biocompatible high entropy alloys using Monte Carlo simulations*, Proceedings of the 54th International October Conference on Mining and Metallurgy, Bor, 2023, pp. 527–530.

(M34) Сопштење са међународног скупа штампано у изводу

1. Marković, G., Manojlović, V., Ružić, J.: *Application of Machine Learning for Predicting Mechanical Properties and Designing Novel Biocompatible Titanium Alloys*, Novel Developments in Materials Informatics – COST Action Session, 2024, p. 1.

2. Milojkov, D., Vuković, N., Sokić, M., Živković-Radovanović, V., Marković, G., Manojlović, V., Koprivica, M.: *Utilization of Aspergillus niger for nanoparticles synthesis from old flotation tailings Majdanpek (Serbia): A study via field emission scanning electron microscopy*, Proceedings of the 12th Conference of the Serbian Ceramic Society "Advanced Ceramics and Application", Belgrade, 2024, pp. 49–50.

3. Marković, G., Manojlović, V., Ružić, J., Sokić, M.: *Predicting the modulus of elasticity for biocompatible titanium alloys*, Proceedings of the 9th Conference of Young Chemists of Serbia, Belgrade, 2023, p. 165.

4. Milojkov, D., Marković, G., Sokić, M., Manojlović, V., Mutavdžić, D., Janjić, G.: *Luminescence transitions of Pr^{3+} ($4f^2$) in fluorapatite nanocrystals for potential biomedical application*, Program and the Book of Abstracts, The 11th Serbian Ceramic Society Conference "Advanced Ceramics and Application", Belgrade, 2023, pp. 38–39.

5. Manojlović, V., Marković, G.: *Designing biocompatible titanium alloys: machine learning approach*, Јесењи симпозијум о термодинамици и фазним дијаграмима, 2023, стр. 11–12.

(M52) Рад у часопису националног значаја

1. Manojlović, V. D., Marković, G.: *Titanium Alloys Database for Medical Applications*, Metallurgical and Materials Data, 1(1), 2023, pp. 1–6.

1.3. Оцена подобности кандидата за рад на предложеној теми

На основу досадашњег рада и показаних резултата истраживања у области металуршког инжењерства, а нарочито у области дизајна и карактеризације легура титана применом напредних рачунарских метода, као и броја и квалитета објављених радова, Комисија оцењује да је Гордана Д. Марковић, мастер инж. металургије, показала склоност, висок степен самосталности и изразиту способност за обављање научноистраживачког рада, те да је пододна за рад на предложеној теми докторске дисертације.

2. Предмет и циљ истраживања

2.1. Предмет научног истраживања

Титан и његове легуре одликују се изузетном комбинацијом механичких својстава – ниским модулом еластичности, високом чврстоћом, добром биокompatибилношћу и отпорношћу на корозију. Због тога су легуре титана нашле примену у разним гранама индустрије, а посебно у медицини, где се користе за израду ортопедских имплантата. До сада је најчешће коришћена легура Ti–6Al–4V, али њене компоненте (алуминијум и ванадијум) могу имати цитотоксичне ефекте у људском организму.

Иако је модул еластичности ове комерцијалне легуре (око 110 GPa) значајно нижи у односу на друге металне материјале који се користе за сличне намене, он је и даље значајно виши од модула еластичности кости (10–30 GPa), што може довести до смањења густине кости и деградације имплантата услед ефекта заштите од оптерећења (енгл. "stress shielding").

Савремена истраживања усмерена су на развој нових легура титана које садрже биокompatибилне елементе, при чему су најзаступљенији легирајући елементи ниобијум (Nb), цирконијум (Zr), тантал (Ta), рутенијум (Ru), калај (Sn), волфрам (W), гвожђе (Fe), манган (Mn), силицијум (Si) и хафнијум (Hf). Посебан акценат се ставља на постизање β -структуре, с обзиром да легуре титана са β -фазама поседују најнижи модул еластичности у оквиру ове групе материјала. Поред садржаја β -фазе, неопходно је пратити и укупне фазне трансформације које се одвијају током хлађења или накнадних термичких (или термо-механичких) третмана, јер оне могу значајно утицати на микроструктуру и механичка својства легура.

Иако су поједини системи легура титана у великој мери већ испитани и показали задовољавајуће резултате, постоји значајан простор за даља испитивања, посебно у оквиру трокомпонентних и четворокомпонентних легура. Њихова потенцијална примена и међусобни утицај елемената на механичка својства у сложенијим системима остају отворена питања која захтевају додатна истраживања.

Предмет овог научног истраживања је дизајн, синтеза и карактеризација нових легура титана. Дизајн легура подразумева примену машинског учења на свеобухватну базу података легура титана, као и коришћење DFT (Density Functional Theory) и MD (Molecular Dynamics) симулација за предвиђање њихових структурних и механичких својстава.

Синтеза легура титана изводи се у инертној атмосфери (аргон или вакуум), најчешће коришћењем плазма лучне или индукционе пећи, чиме се обезбеђују чистота и хомогеност материјала. Карактеризација добијених легура обухвата испитивање механичких својстава, укључујући модул еластичности, затезну чврстоћу и границу течења.

Додатно, карактеризација обухвата микроструктурне анализе, као и методе наноидентације које пружају детаљан увид у структурне параметре и настале фазне промене у добијеним легурама титана. Добијени експериментални резултати се упоређују са резултатима модела машинског учења и MD симулација, чиме се омогућава верификација теоријских предвиђања.

На тај начин, добијају се смернице које могу користити будућим истраживањима легура титана где се експерименталним радом (процесни параметри топљења у инертној

атмосфери, као и параметри термичке обраде, испитивање механичких и структурних својстава, и др) модели верификују и оптимизују.

2.2. Циљеви истраживања

Циљ овог истраживања је развој и експериментална валидација модела за предвиђање механичких својстава нових легура титана, заснованих на напредним рачунарским техникама: машинском учењу, DFT (Density Functional Theory) и MD (Molecular Dynamics). Машинско учење примењује се код трокомпонентних и четворокомпонентних дијаграма, при чему се анализирају различити удели легирајућих елемената и предвиђају области састава са најнижим вредностима модела еластичности. Истовремено, DFT и MD симулације користе се за предвиђање стабилности легура, интеракција унутар легуре и симулацију наномеханичког одговора.

Очекивани резултати укључују:

- Развој поузданих предиктивних модела који повезују састав легуре титана са кључним механичким својствима (нпр. модул еластичности, затезна чврстоћа).
- Идентификацију и експерименталну потврду оптималних легура титана са ниским модулом еластичности.
- Дубље разумевање фазних трансформација и сложених интеракција у систему применом термо-механичких третмана, даље ће олакшати дизајн и фино подешавање механичких својстава легура титана за медицинске и друге захтевне инжењерске примене.

2.3. Релевантни библиографски извори

- [1.] Senopati, G., Rashid, R. A. R., Kartika, I., Palanisamy, S.: *Recent development of low-cost β -Ti alloys for biomedical applications: a review*, Metals, 13(2), 2023, pp. 194.
- [2.] Sarraf, M., Rezvani Ghomi, E., Alipour, S., Ramakrishna, S., Sukiman, N. L.: *A state-of-the-art review of the fabrication and characteristics of titanium and its alloys for biomedical applications*, Bio-design and Manufacturing, 2021, pp. 1–25.
- [3.] Skripnyak, N.: *Theoretical description of Ti and Ti alloys from first principles*, Linköping University, Sweden, 2020.
- [4.] Yumak, N., Aslantaş, K.: *A review on heat treatment efficiency in metastable β titanium alloys: the role of treatment process and parameters*, Journal of Materials Research and Technology, 9(6), 2020, pp. 15360–15380.
- [5.] Marković, G., Manojlović, V., Ružić, J., Sokić, M.: *Predicting low-modulus biocompatible titanium alloys using machine learning*, Materials, 16(19), 2023, pp. 6355.
- [6.] Manojlović, V. D., Marković, G.: *Titanium alloys database for medical applications*, Metallurgical and Materials Data, 1(1), 2023, pp. 1–6.
- [7.] Jawed, S. F., Rabadia, C. D., Khan, M. A., Khan, S. J.: *Effect of alloying elements on the compressive mechanical properties of biomedical titanium alloys: a systematic review*, ACS Omega, 7(34), 2022, pp. 29526–29542.
- [8.] Wu, C. T., Chang, H. T., Wu, C. Y., Chen, S. W., Huang, S. Y., Huang, M., et al.: *Machine learning recommends affordable new Ti alloy with bone-like modulus*, Materials Today, 34, 2020, pp. 41–50.

- [9.] Hart, G. L., Mueller, T., Toher, C., Curtarolo, S.: *Machine learning for alloys*, Nature Reviews Materials, 6(8), 2021, pp. 730–755.
- [10.] Cardoso, G. C., de Almeida, G. S., Corrêa, D. O. G., Zambuzzi, W. F., Buzalaf, M. A. R., Correa, D. R. N., & Grandini, C. R.: *Preparation and characterization of novel as-cast Ti-Mo-Nb alloys for biomedical applications*, Scientific Reports, 12(1), 2022, pp. 11874.

3. Полазне хипотезе

Предложена истраживања у оквиру ове докторске дисертације полазе од хипотезе да је могуће, применом напредних рачунарских метода као што су машинско учење, DFT (Density Functional Theory) и MD (Molecular Dynamics) симулације, дизајнирати, предвидети и карактерисати нове биокompatibilне легуре титана с нижим модулом еластичности, које су погодне за примену у медицини, посебно у области ортопедских имплантата. При томе се полази од следећих кључних претпоставки:

- Биокompatibilни елементи као што су Nb, Zr, Ta, Sn, Hf и др., могу у различитим концентрацијама стабилизovati β -фазу у титану, која показује најнижи модул еластичности у односу на остале структуре легура титана.
- Коришћењем алгоритама машинског учења на великој бази експерименталних и симулационих података могуће је предвидети оптималне хемијске саставе легура који имају најбоље комбинације механичких својстава, пре свега низак модул еластичности и високу чврстоћу.
- DFT прорачуни ће се користити за детаљну карактеризацију легура кроз израчунавање константи решетке, еластичних константи, површинске енергије и енергије грешке слагања, са циљем разумевања механичког понашања материјала на већим скалама.
- На основу DFT резултата, биће развијен емпиријски потенцијал за MD симулације који ће омогућити моделовање интеракција унутар саме легуре и симулацију наномеханичког одговора (нпр. наноиндентација и затезни тестови) на датим легурама.
- Упоређивањем експериментално добијених резултата са резултатима симулација омогућава се верификација и оптимизација модела, као и идентификација састава погодних за примену у реалним биомедицинским условима.

4. Научне методе истраживања

Методе истраживања обухватају три кључне фазе: дизајн легура титана, синтезу материјала и карактеризацију добијених легура. У првој фази (дизајн легура титана) користиће се машинско учење како би се, на основу базе експерименталних података (претрагом научне литературе), формирали модели за предвиђање механичких својстава трокомпонентних и четворокомпонентних легура. На тај начин предвиђају се области састава са најнижим модулом еластичности, а посебан акценат биће стављен на примену алгоритама попут неуронских мрежа или других техника машинског учења. Истовремено ће се користити термодинамички софтвери (Thermo-Calc) за анализу стабилности фаза и формирање интерметалних једињења ради планирања почетних предлегура (шарже за топљење). DFT (Density Functional Theory) ће се применити ради увида у електронску структуру легура и

енергетску стабилност различитих атомско-електронских конфигурација. MD (Molecular Dynamics) симулације ће пружити детаљан увид у процесе дифузије и механизме деформације на атомском нивоу.

Синтеза материјала представља наредну фазу у којој ће се припремати легуре претходнодефинисаних хемијских састава. У зависности од експерименталних могућности и нивоа чистоће који се захтевају, испитиване легуре титана ће се синтетисати у плазма лучној пећи и инертној атмосфери коришћењем аргона или индукционим топљењем у вакууму, уз одговарајућу контролу тока процеса и атмосфере. Након топљења и ливења, примењује се термомеханичка обрада, како би се обезбедила хомогеност и одговарајућа микроструктура (садржај бета фазе и величина зрна).

Последњу фазу истраживања чини карактеризација добијених легура, која ће обухватити испитивања механичких и структурних својстава. Наноиндентација ће се користити за прецизно одређивање локалног модула еластичности, и утицај фаза на механичке карактеристике на микро и нано нивоу, а затезна испитивања за одређивање макроскопских механичких карактеристика као што су чврстоћа, границе течења и модула еластичности. За дубљи увид у микроструктуру и расподелу фаза користиће се оптичка, скенинг електронска микроскопија (SEM) и трансмисиона електронска микроскопија (ТЕМ), као и рендгенска структурна анализа, при чему је планирано и детаљно праћење густине дислокација. За квантификацију присутних фаза, величина зрна и осталих микроструктурних параметара користиће се програмска решења попут MIPAR, чиме ће се добити статистички репрезентативни подаци о микроструктури. Добијени експериментални резултати биће затим упоређени са моделима формираним у оквиру прве фазе, што ће омогућити валидацију и унапређење како машинских алгоритама, тако и параметара коришћених у DFT/MD и термодинамичким симулацијама. Резултат овог комплексног приступа биће оптимизација састава легура титана који испуњавају кључне захтеве: ниска вредност модула еластичности, стабилна микроструктура и погодност за даљу биомедицинску и инжењерску примену.

5. Очекивани научни допринос

Научни допринос предложене докторске дисертације огледа се у више повезаних сегмената који обједињују развој рачунарских модела, базу података, дизајн и експерименталну верификацију нових легура титана. Конкретно:

- Развија се интегрисани предиктивни модел који комбинује резултате симулација заснованих на теорији густине електронског стања (DFT) и алгоритме машинског учења у циљу предвиђања механичких својстава легура титана, са акцентом на модул еластичности, затезну чврстоћу и границу течења.
- Формира се и структурише нова база података која садржи хемијске саставе, структурне параметре и механичка својства биокомпатибилних легура титана, при чему се уводе нови критеријуми за класификацију легура на основу модула еластичности, фазне стабилности и биокомпатибилности. Ова база података служи као основа за будуће примене машинског учења у дизајну биоматеријала легура титана.
- Врши се анализа утицаја појединачних параметара из базе података на механичка својства легура, уз тумачење резултата на основу развијених рачунарских предиктивних модела. Посебна пажња посвећена је идентификацији неочигледних корелација, као што је утицај специфичне топлоте на модул еластичности.
- Развијају се и синтетишу нове трокомпонентне или четворокомпонентне легуре титана, које укључују биокомпатибилне елементе (на пример, Nb, Zr, Ta, Sn) и показују смањен модул еластичности, чиме се приближавају механичким својствима кости и смањују негативни ефекти „stress shielding“-а. Ове легуре су посебно погодне за примену у области ортопедских имплантата.
- Истражује се утицај термомеханичке обраде на фазни састав легура, с фокусом на стабилизацију и удео β -фазе, чиме се омогућава боље разумевање утицаја параметара термомеханичке обраде на крајњу микроструктуру и механичка својства материјала.

6. План истраживања и структура рада

Предмет рада докторске дисертације је дизајн, синтеза и карактеризација нових легура титана, са оптимизованим механичким и структурним својствима која омогућавају њихову потенцијалну примену у биомедицинским имплантатима. Истраживање ће комбиновати напредне рачунарске методе (машинско учење, DFT и MD симулације) са експерименталним техникама синтезе и карактеризације, како би се развиле легуре са ниским модулом еластичности, стабилном бета фазом и добром биокомпатибилношћу.

Докторска дисертација биће структурирана кроз следећа поглавља:

1. Увод

У овом поглављу биће дефинисан предмет истраживања, истакнут научни и технолошки значај рада, формулисани циљеви, мотивација и очекивани допринос. Биће приказана и релевантност теме у контексту савремених истраживања материјала за биомедицину.

2. Теоријски део

Ово поглавље обухвата:

- Основна својства титана и његових легура, са акцентом на механичка својства, фазну стабилност и биокompatibilност.
- Преглед постојећих легура титана које се користе у биомедицинским применама и њихових ограничења.
- Литературни преглед у области примене метода дизајна, синтезе и карактеризације легура титана.

3. Експериментални део

3.1. Рачунарске методе за развој нових материјала

У овом поглављу биће обрађене следеће целине:

- Машинско учење: формирање базе података, опис развоја методе обраде и анализе података, избор и имплементација предиктивних модела за процену механичких својстава.
- DFT симулације: опис методе за прорачун параметара кристалне решетке, еластичних константи, површинских енергија и енергија стаковања ради бољег разумевања механичког понашања на атомском нивоу.
- MD симулације: развој емпиријског међуатомског потенцијала за одабрани систем и моделовање наномеханичког одговора (наноидентација и затезна деформација).

3.2. Развој нових легура титана

Ово поглавље обухвата:

- Припрему легура: мерење и мешање прахова, синтеза у инертној атмосфери (аргон/вакуум), термомеханичка обрада узорака.
- Методе карактеризације: структурна и фазна анализа (XRD, SEM, TEM), хемијска анализа састава, одређивање механичких својстава (наноидентација, затезна испитивања), мерење садржаја бета фазе и величине зрна (Міrag софтвер).

4. Резултати и дискусија

Биће представљени и критички анализирани добијени резултати:

- Резултати напредних рачунарских метода за предвиђање механичких својстава легура титана.
- Структура и микроструктурне карактеристике синтетисаних легура, удео бета фазе, величина зрна и распоред фаза.
- Поређење резултата добијених експериментима и симулацијама, са посебним освртом на подударност у наномеханичком одговору (наноидентација и затезање).

5. Закључак

У закључку ће бити сумирани најважнији резултати, истакнут научни допринос рада, као и представљене могућности за даљу примену компјутерских модела у рационалном дизајну легура титана за биомедицинску и ширу инжењерску примену.

6. Литература

Садржаће све цитиране изворе, као и радове који су настали као резултат истраживања у оквиру докторске дисертације.

7. Закључак и предлог

На основу изложеног, Комисија сматра да је тема предложене докторске дисертације под насловом „Развој и дизајн нових легура титана применом напредних рачунарских метода“, кандидаткиње Гордане Д. Марковић, мастер инжењера металургије, научно заснована и да представља значајан допринос научној области металуршког инжењерства, за коју је Технолошко-металуршки факултет Универзитета у Београду матична установа. Уже области предложене теме су физичка металургија и теорија металуршких процеса.

Комисија предлаже Наставно-научном већу Технолошко-металуршког факултета Универзитета у Београду да кандидаткињи Гордани Д. Марковић одобри израду докторске дисертације под наведеним насловом. За менторе докторске дисертације Комисија предлаже др Васа Манојловића, ванредног професора Технолошко-металуршког факултета Универзитета у Београду, и др Јовану Ружић, вишег научног сарадника Института „Винча“.

17. 4. 2025.

ЧЛАНОВИ КОМИСИЈЕ

.....
Др Жељко Камберовић, редовни професор
Универзитета у Београду, Технолошко-металуршки факултет

.....
Др Вељко Ђокић, научни саветник,
Иновациони центар Технолошко-металуршки факултета, Универзитета у Београду

.....
Др Стефан Дикић, доцент
Универзитета у Београду, Технолошко-металуршки факултет

.....
Др Гвозден Јовановић, научни сарадник,
Институт за технологију нуклеарних и других минералних сировина, Београд

.....
Др Франциско Хавијер Домингез Гутијерез, ванредни професор,
Национални центар за нуклеарна истраживања, Отвоцк, Пољска