

Примљено: 31.10.2014			
Орг. јед.	Број	Трилог	Вредност
01	3619		

Наставно-научном већу
Природно-математичког факултета
Универзитета у Нишу

На седници Наставно-научног већа Природно-математичког факултета у Нишу, одржаној дана 15.10.2014. год., Одлуком бр. 1062/1-01, одређени смо за чланове Комисије за оцену и одбрану урађене докторске дисертације под називом: **“Структурна карактеризација CaMnO_3 нанопрахова допираних итријумом и теоријско моделовање стабилности перовскитске структуре”**, кандидата мр Јелене Загорац.

Након разматрања урађене докторске дисертације подносимо следећи

ИЗВЕШТАЈ

Докторска дисертација под називом: **“Структурна карактеризација CaMnO_3 нанопрахова допираних итријумом и теоријско моделовање стабилности перовскитске структуре”** написана је на 173 стране формата А4, садржи 6 нумерисаних поглавља, 32 слике и/или графичких приказа, 20 табеларних приказа података и 196 литературних навода.

Поглавља су методолошки адекватно структурирана и изложена следећим редоследом: увод (3 странице), теоријски део (50 страница), експериментални део (8 страница), резултати и дискусија резултата (67 страница), закључак (4 странице), литература (25 страница), резиме (2 стране), summary (2 стране), биографија аутора докторске дисертације (1 страница), библиографија аутора докторске дисертације (5 страница) и изјаве аутора (3 стране).

У **Уводу** докторске дисертације је изложено о перовскитским типовима структуре код једињења опште формуле ABX_3 . Наведено је да је предмет овог истраживања синтеза и испитивање физичких и хемијских особина серије чврстих раствора опште формуле $\text{Ca}_{1-x}\text{Y}_x\text{MnO}_3$ ($0 \leq x \leq 1$), као и предвиђање кристалне структуре у систему CaMnO_3 коришћењем различитих *ab initio* метода. Прахови допирани итријумом се одликују научно-интересантним магнетним, електричним, оптичким и каталитичким особинама и користе се за израду алтернативних извора енергије (нпр. чврсте горивне ћелије), што је наведено као додатни разлог за испитивања спроведена у оквиру ове докторске дисертације. Предмет и циљеви истраживања су подразумевали и развој методе синтезе CaMnO_3 нанопрахова, која омогућава синтеровање материјала на нижим температурама, чиме се обезбеђује и економичност процеса. Поред наведеног, изнето је да је предмет истраживања и теоријско предвиђање кристалних структура у систему CaMnO_3 који имају перовскитски тип структуре, што би требало да допринесе бољем познавању система CaMnO_3 , те познавању његовог понашања на високом и израчунатом негативном притиску, као и прецизнијем утврђивању односа између могућих метастабилних фаза

са перовскитским типом структуре и могућностима њихове (експерименталне/лабораторијске) синтезе.

У **Теоријском делу** докторске дисертације изнети су (различити) принципи експерименталних метода које су коришћене у дисертацији (Rietveld-ова метода), принципи рендгенске фотоелектронске спектроскопије, основи теоријских метода (Hartri-Fokova, Теорија функционалних група, Базични сетови, предвиђање структура програмом SpuDS, локална оптимизација Crystal09 програмом, кристалографска анализа Kplot програмом, визуализација структуре VESTA програмом), писано је о структури перовскита, просторној групи *Pnma* код перовскитског типа структуре, осталим просторним групама код перовскитског типа структуре, те физичким особинама и њиховој зависности од структуре перовскита.

У **Експерименталном делу** докторске дисертације наведени су: методолошки приступ експерименталној процедури, циљеви истраживања, опис синтезе наноструктурних материјала, методе карактеризације синтетисаног материјала, те о рендгенској дифракцији на поликристалном синтетисаном материјалу и рендгенској фотоелектронској спектроскопији примењеној на синтетисаним материјалима, као и Rietveld-овој анализи истраживаног материјала.

У делу **Резултати и дискусија резултата** детаљно су описани резултати остварени применом стандардне и модификоване глицин-нитратне методе у синтези нанопрахова опште формуле $\text{Ca}_{1-x}\text{Y}_x\text{MnO}_3$ ($0 \leq x \leq 1$); структура и микроструктура добијених нанопрахова одређена је Rietveld-овом анализом на основу података добијених рендгенском дифракцијом; одређене су просторне групе у којима кристалишу испитиване перовскитске фазе. Утврђено је и наведено да допирање итријумом изазива редукцију Mn^{4+} до Mn^{3+} , те да са повећањем садржаја итријума расте и запремина јединичних ћелија и просечна дужина веза конкретно наведеног типа у сваком од испитиваних перовскита. Потврђено је да присуство Mn^{3+} катјона доводи до појаве Јан-Телеровог ефекта. Микроструктурна анализа је потврдила да су добијени прахови нанометарских димензија. Истраживања нанопрахова у којима су доминантне кристалне фазе чланови серије чврстих раствора ABO_3 , који имају перовскитску структуру и где је А (Са, Y), а В (Mn^{4+} или Mn^{3+}), обухватила су синтезу, фазну, структурну, хемијску и морфолошку карактеризацију новодобијених нанопрахова. На основу Голдшмитовог фактора толеранције и глобалног индекса нестабилности, утврђено је да постоји реална могућност формирања перовскитске структуре из смеше оксида различитог номиналног састава типа CaMnO_3 допираног са итријумом. Утврђен је фазни састав свих узорака и одређена заступљеност појединих фаза, те вечина кристалита анализом микроструктурних параметара. Сви испитивани нанопрахови имају специфичне карактеристике, а пре свега, фазни састав и хемијски састав појединих кристалних фаза, ромбичну симетрију доминантне перовскитске фазе и неуређеност у структури перовскита. Врста и концентрација допирајућег катјона, редукција мангана, као и присуство ваканција имају пресудан утицај на стварање структурно различитих перовскита. Теоријским тумачењима и истраживањима извршено је предвиђање кристалних структура у систему CaMnO_3 које имају

перовскитски тип структуре, те праћењем нагињања октаедара и коришћењем методе претраге базе података у ABX_3 системима, добијен је низ CaMnO_3 структурних кандидата. За сваки од добијених кандидата урађена је локална *ab initio* оптимизација применом теорије функционала густине и Hartree-Fock методе, при чему су резултати добијени коришћењем B3LYP функционала, показали најбоље слагање са постојећим експерименталним подацима. Добијени резултати су показали да се поједини од структурних кандидата са ниском енергијом, и углавном са ромбичном и моноклиничном симетријом, и који показују структурне сличности са експериментално доступном *Pnma* модификацијом, могу синтетисати на високој температури. Истраживање је показало да ће на израчунатом негативном притиску доћи до фазне трансформације из перовскитског у илменитски структурни тип. Резултати ове докторске дисертације су допринели бољем познавању система CaMnO_3 , познавању његовог понашања на високом и израчунатом негативном притиску, као и прецизнијем утврђивању односа између могућих метастабилних фаза са перовскитским типом структуре.

У поглављу **Закључак** су сумирани претходно наведени резултати, те појединачни закључци изнети на концизнији начин.

У поглављу **Литература** су наведене референце, које су навођене у оквиру текста докторске дисертације.

У поглављима **Извод** и **Summary** су укратко приказани најважнији резултати ове докторске дисертације на српском и енглеском језику.

Библиографски подаци кандидата

M21 – Радови објављени у врхунским међународним часописима

1. Kremenovic, A., Blanus, J., Antic, B., Colombari, Ph., Kahlenberg, V., Covalekic, J., **Dukic, J.**: *A Y_2O_3 : Yb nanoscale magnet obtained by HEBM: C_3/C_2 site occupancies, size/strain analysis and crystal field levels of Yb^{3+} ions*. Nanotechnology 18, 145616 (8pp), (2007).
2. Boskovic, S., **Dukic, J.**, Matovic, B., Zivkovic, Lj., Vlajic, M. Krstic, V.: *Nanopowders Sintering and Electrical Conductivity of Calcium Manganite Solid Solutions*. Journal of Alloys and Compounds 463, 282–287, (2008).
3. **Dukić, J.**, Bošković, S., Matović, B.: *Crystal structure of Ce-doped CaMnO_3 perovskite*, Ceramics International 35, 787-790, (2009).
4. Babić, B., Bučevac, D., Radosavljević-Mihajlović, A., Došen, A., **Zagorac, J.**, Pantić, J., Matović, B.: *New manufacturing process for nanometric SiC*. Journal of the European Ceramic Society 32 (9), 1901-1906, (2012).

5. Radosavljević-Mihajlović, A. S., Prekajski, M. D., **Zagorac, J.**, Došen A. M., Nenadović S. S., Matović, B. Z: *Preparation, structural and microstructural properties of $Ba_{0.64}Ca_{0.32}Al_2Si_2O_8$ ceramic phase*. *Ceramics International* 38(3), 2347-2354, (2012).
6. Rosic, M., Logar, M., **Zagorac, J.**, Devecerski, A., Egelja, A., Kusigerski, A., Spasojevic, V., Matovic, B: *Investigation of the structure and magnetic behaviour of nanostructure $Ce_{1-x}Gd_xMnO_3$ ($x=0.05; 0.1; 0.15; 0.2$) obtained by modified glycine nitrate procedure*. *Ceramics International* 39, 1853-1861, (2013).
7. Matović, B., **Dukić, J.**, Babić, B., Bučevac, D., Dohcevic-Mitrovic, Z., Radovic, M., Boskovic, S: *Synthesis, calcination, and characterization of nanosized ceria powders by self-propagating room temperature method*. *Ceramics International* 39, 5007-5012, (2013).
8. Hundt, R., Schön, J. C., Neelamraju, S, **Zagorac, J.**, Jansen, M: *CCL: an algorithm for the efficient comparison of clusters*. *Journal of Applied Crystallography*, Vol. 46, Issue 3, 587–593, (2013).
9. Zagorac, D., Schön, J. C., **Zagorac, J.**, Jansen, M: *Prediction of structure candidates for zinc oxide as a function of pressure and investigation of their electronic properties*. *Phys. Rev. B* 89, 075201 (pp. 13), (2014).

M22 – Рад објављен у истакнутом међународном часопису

Рад под бр. 10) је из области и теме докторске дисертације

10. **Zagorac, J.**, Zagorac, D., Zarubica, A., Schön, J.C., Djuris, K., Matovic, B: *Prediction of possible $CaMnO_3$ modifications using an ab initio minimization data mining approach*, *Acta Cryst. B* 70, 809-819, (2014).

M23 – Радови објављени у међународним часописима

Рад под бр. 17) је из области и теме докторске дисертације

11. **Dukić, J.**, Bošković, S., Matović, B., Dimčić, B., Karanović Lj: *Rietveld refinement of crystal phases $(Ca_{1-x}La_x)MnO_3$ with perovskite-type structure*. *Materials Science Forum*, Vol. 555 (2007).

12. Matović, B., **Dukić, J.**, Devečerski, A., Bošković, S., Ninić, M., Dohčević-Mitrović, Z: *Crystal structure analysis of Nd-doped ceria solid solutions*. Science of Sintering 40(1), pp. 63-68, (2008).
13. Boskovic, S., Zec, S., Ninic, M., Nenadovic, M., **Dukic, J.**, Matovic, B., Djurovic, D., Aldinger, F: *Nanosized ceria solid solutions obtained by different chemical routes*. Journal of Optoelectronics and Advanced Materials 10(3), pp. 515-519, (2008).
14. Šaponjić, A., Matović, B., Babić, B., **Zagorac, J.**, Poharc-Logar, V., Logar, M: *Cost-effective synthesis of Si₃N₄-SiC nanocomposite powder*. Optoelectronics and Advanced Materials, Rapid Communications 4(11), pp. 1681-1684, (2010).
15. **Zagorac, J.**, Boskovic, S., Matovic, B., Babic-Stojic, B: *Structure and Magnetic Investigations of Ca_{1+x}Y_xMnO₃ (x=0, 0.1, 0.2, 0.3) and Mn⁴⁺/Mn³⁺ Relation Analysis*, Science of Sintering, vol. 42 ,issue 2, p. 221, (2010).
16. Zagorac, D., Schön, J. C., **Zagorac, J.**, Pentin I. V., Jansen, M: *Zinc oxide: Connecting theory and experiment*. Process. Appl. Ceram., 7, 111 (2013).
17. **Zagorac, J.**, Zarubica, A., Radosavljević-Mihajlović, A., Zagorac, D., Matović, B: *Structural study of nanosized yttrium-doped CaMnO₃ perovskites*. Bull. Mater. Sci. 37, 407-416, (2014).

M34 – Саопштење са научног скупа међународног значаја штампано у изводу

Саопштење под бр. 6) је из области и теме докторске дисертације

1. **Dukić, J.**, Matović, B., Bošković, S: *Influence of Mechanical Activation on Decomposition of LiYO₂ Phase*. SEECChE1, September 25-28, 2005, 239.
2. Rosić, M., **Zagorac, J.**, Devečerski, A., Egelja, A., Šaponjić, A., Spasojevic, V., Matović, B: *Examination of nanostructured Ca_{1-x}Gd_xMnO₃ (x=0.05; 0.1; 0.15; 0.2) obtained by modified glycine nitrate procedure*. The Second Conference of The Serbian Ceramic Society, June 5-7, (2013), Belgrade, Serbia.
3. **Dukić, J.**, Matović, B., Bošković, S: *Synthesis and structure of perovskite CaMnO₃*. School of ceramics, VI Students Meeting, December 1 – 2, 2005, 99 – 101.

4. Devečerski, A., **Dukić, J.**, Matović, B: *Soft mechanochemical synthesis of alumina-stabilized zirconia*. School of ceramics, VI Students Meeting, December 1 – 2, 2005, 53 – 55.
5. Rosić, M., **Zagorac, J.**, Devečerski, A., Egelja, A., Šaponjić, A., Spasojević, V., Matović, B: *Examination of nanostructured $Ca_{1-x}GdxMnO_3$ ($x=0.05; 0.1; 0.15; 0.2$) obtained by modified glycine nitrate procedure*. The Second Conference of The Serbian Ceramic Society, June 5-7, (2013), Belgrade, Serbia.
6. **Zagorac, J.**, Zagorac, D., Zarubica, A., Matovic, B: *Investigation of possible tilt systems in $CaMnO_3$ perovskite using an ab initio approach*. 2nd Conference of The Serbian Ceramic Society (2013).
7. **Zagorac, J.**, Schön, J. C., Jansen, M: *Investigation of the structure of nanosized $NanCl_n$ ($n = 8, 16, 24, 32$) clusters using global optimization*. Joint event of 11th Young Researchers' Conference: Materials Science and Engineering and the 1st European Early Stage Researcher's Conference on Hydrogen Storage (2012).

M64 – Саопштење са научног скупа националног значаја штампано у изводу

1. **Dukic, J.**, Bošković, S., Matović, B., Zivkovic, Lj: *Dobijanje i osobine Y - dopiranih manganata kalcijuma*. 50. ETRAN , Beograd, Juni 2006.
2. Šaponjić, A., Matović, B., **Dukic, J.**, Mihajlović, A., Bošković, S: *Structural refinement of nano sialon powder using X-ray diffraction data*. Yucomat 2006, Izvodi radova, P.S.B. 19.
3. **Dukic, J.**, Bošković, S., Matović, B., Dimčić, B., Karanović, Lj: *Rietveld refinement of crystal phases $Ca_{0.7}La_{0.3}MnO_3$ and $Ca_{0.7}La_{0.3}Mn_{0.8}Ce_{0.2}O_3$ perovskite structures*. Yucomat 2006, Izvodi radova, O.S.C. 19.
4. Bučevac, D., Bošković, S., Dimčić, B., **Dukic, J.**: *Effect of characteristics of Si_3N_4 starting powder on fracture toughness of Si_3N_4 ceramics*. XLIV Savetovanje Srpskog hemijskog društva, Izvodi radova K-P01, Beograd 2006.
5. **Dukic, J.**, Karanović, Lj., Kremenović, A., Bošković, S., Matović, B: *Structure and microstructure of $Ca_{1-x}Y_xMnO_3$ and $Ca_2Mn_3O_8$* . 20. XIII konferencija srpskog kristalografskog društva, Izvodi radova, 51, (2006).

6. Stojanović, J., Radosavljević-Mihajlović, A., **Dukic**, J.: *The mineralogical and crystallographic characterization of analcime tuff from Jovici deposit, Bosnia and Herzegovina*. XIII konferencija srpskog kristalografskog društva, 2006, Izvodi radova, 48.
7. Radosavljevic Mihajlovic, A., **Dukic**, J., Vulic, P., Matovic, B: *Scanning electron microscopy and size-strain microstructure analysis of partial exchange hexacelsian and its feldspar phase*. 3rd Serbian Congress for microscopy, Belgrade, 2007.
8. **Dukic**, J., Bošković, S., Matović, B., Babic-Stojic, B: *Structure and magnetic investigations of $Ca_{1-x}Y_xMnO_3$ ($x=0, 0.1, 0.2, 0.3$) and Mn^{4+}/Mn^{3+} relation analysis*. ECERS 2007.
9. **Dukic**, J., Bošković, S., Matović, B., Bučevac D: *Synthesis and crystal structure of $Ca_{(1-x)}Y_xMnO_3$* . XLIV Savetovanje Srpskog hemijskog društva, Izvodi radova K-P07, Beograd 2006.
10. **Dukic**, J., Bošković, S., Matović, B., Kahlenberg, V: *Crystal structure of A and B site Ce doped $CaMnO_3$* . Yucomat, Izvodi radova, P.S.B. 12 (2007).

У свом досадашњем научно-истраживачком раду кандидат је објавио девет научних радова штампаних у врхунским часописима међународног значаја (M_{21}), један рад у истакнутом часопису међународног значаја (M_{22}), и седам радова у међународним часописима (M_{23}), као и већи број научних саопштења презентованих на међународним научним скуповима и/или на скуповима националног значаја која су штампана у целини или у изводу.

Резултати истраживања проистекли из ове докторске дисертације до сада су објављени у два рада у међународним часописима категорије M_{20} (прецизније - један рад категорије M_{22} и један рад категорије M_{23}), као и у једном саопштењу презентованом на међународном научном скупу.

На основу претходно изложеног, Комисија је донела следећи:

ЗАКЉУЧАК

Докторска дисертација под називом: “Структурна карактеризација CaMnO_3 нанопрахова допираних итријумом и теоријско моделовање стабилности перовскитске структуре”, мр Јелене Загорац, представља оригиналан и самосталан научни рад, који је логички и методолошки адекватно конципиран. У наведеној докторској дисертацији, утврђена је оптимална метода синтезе CaMnO_3 нанопрахова допираних итријумом; резултати ових истраживања доприносе бољем познавању система CaMnO_3 , његовог понашања на високом и израчунатом негативном притиску, као и бољем утврђивању односа између могућих метастабилних фаза са перовскитским типом структуре.

Кандидат је реализовао постављене циљеве који дају значајан теоријски и практичан допринос развоју уже научне области примењена и индустријска хемија, а посебно научне дисциплине која се односи на науку о материјалима. Ова докторска дисертација садржи новине у домену оптимизоване синтезе нанопрахова CaMnO_3 допираних итријумом, новине у тумачењу физичко-хемијских својстава ових наноструктурних материјала, те теоријском моделовању стабилности перовскитске структуре.

Део резултата из ове докторске дисертације је верификован публикавањем радова у међународним научним часописима категорије M_{20} (прецизније, један рад категорије M_{22} и један рад категорије M_{23}) и презентовањем саопштења на међународном научном скупу, чиме је потврђена оригиналност и научна заснованост резултата из дисертације.

На основу свега изложеног, Комисија предлаже Наставно-научном већу Природно-математичког факултета Универзитета у Нишу да кандидату мр Јелени Загорац, одобри јавну одбрану докторске дисертације.

У Нишу и Београду, октобар 2014. год.

А. Зарубица Комисија:

Др Александра Зарубица, ванред. проф.
Природно-математичког факултета у Нишу (ментор)

Бранко Матовић
Др Бранко Матовић, научни саветник
Института за нуклеарне науке “Винча”

Александар Бојић
Др Александар Бојић, ред. проф.
Природно-математичког факултета у Нишу

М. Ранђеловић
Др Марјан Ранђеловић, доцент
Природно-математичког факултета у Нишу

ЗАКЉУЧАК

Докторска дисертација под називом: “Структурна карактеризација CaMnO_3 нанопрахова допираних итријумом и теоријско моделовање стабилности перовскитске структуре”, мр Јелене Загорац, представља оригиналан и самосталан научни рад, који је логички и методолошки адекватно конципиран. У наведеној докторској дисертацији, утврђена је оптимална метода синтезе CaMnO_3 нанопрахова допираних итријумом; резултати ових истраживања доприносе бољем познавању система CaMnO_3 , његовог понашања на високом и израчунатом негативном притиску, као и бољем утврђивању односа између могућих метастабилних фаза са перовскитским типом структуре.

Кандидат је реализовао постављене циљеве који дају значајан теоријски и практичан допринос развоју уже научне области примењена и индустријска хемија, а посебно научне дисциплине која се односи на науку о материјалима. Ова докторска дисертација садржи новине у домену оптимизоване синтезе нанопрахова CaMnO_3 допираних итријумом, новине у тумачењу физичко-хемијских својстава ових наноструктурних материјала, те теоријском моделовању стабилности перовскитске структуре.

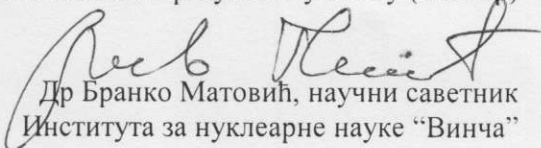
Део резултата из ове докторске дисертације је верификован публикавањем радова у међународним научним часописима категорије M_{20} (прецизније, један рад категорије M_{22} и један рад категорије M_{23}) и презентовањем саопштења на међународном научном скупу, чиме је потврђена оригиналност и научна заснованост резултата из дисертације.

На основу свега изложеног, Комисија предлаже Наставно-научном већу Природно-математичког факултета Универзитета у Нишу да кандидату мр Јелени Загорац, одобри јавну одбрану докторске дисертације.

У Нишу и Београду, октобар 2014. год.

Комисија:

Др Александра Зарубица, ванред. проф.
Природно-математичког факултета у Нишу (ментор)


Др Бранко Матовић, научни саветник
Института за нуклеарне науке “Винча”

Др Александар Бојић, ред. проф.
Природно-математичког факултета у Нишу

Др Марјан Ранђеловић, доцент
Природно-математичког факултета у Нишу