

НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ ФИЗИЧКОГ ФАКУЛТЕТА УНИВЕРЗИТЕТА У БЕОГРАДУ

Пошто смо на седници Наставно-научног већа Физичког факултета Универзитета у Београду одржаној 27. 3. 2019. године одређени за чланове Комисије за преглед и оцену докторске дисертације „**Modeling the Behaviour of Confined Dipolar and Ionic Systems**” (наслов на српском језику: „**Моделовање понашања просторно ограничених диполних и јонских система**”) из уже научне области Физика кондензоване материје и статистичка физика, коју је кандидат Миљан Дашић, мастер инжењер електротехнике и рачунарства, предао Физичком факултету у Београду дана 25. 3. 2019. године подносимо следећи

ИЗВЕШТАЈ

1. Основни подаци о кандидату

1.1. Биографски подаци

Миљан Дашић рођен је 3.11.1990. године у Параћину, Република Србија. У Параћину је завршио основну школу и гимназију.

Основне академске студије на Електротехничком факултету Универзитета у Београду, одсек Физичка електроника, смер Наноелектроника, оптоелектроника и ласерска техника, започиње 2009. године и завршава их јула 2013. године са просечном оценом 9,93. Награђен је Доситејевом стипендијом Фонда за младе таленте за школску 2012/2013. и 2013/2014. годину. Мастер академске студије на Електротехничком факултету Универзитета у Београду, одсек Физичка електроника, модул Наноелектроника и фотоника завршио је јула 2014. године са просечном оценом 10,00, одбранивши мастер рад на тему „*Прорачун структуре и енергије самоорганизованих магнетних честица у геометријски ограниченој средини*“. Мастер рад је израђен у Лабораторији за примену рачунара у науци Института за физику Београд, а израдом рада руководио је др Игор Станковић. За време основних и мастер студија остварио је више боравака и пракси у престижним светским универзитетима, Технион у Израелу, Тиндал Националном Институту у Ирској, и Универзитетима Колорадо у Болдеру у САД-у и Лапенранта у Финској, а добио је и награду ЕРСТЕ банке за истраживачки рад.

У октобру 2014. године уписује докторске академске студије на Физичком факултету Универзитета у Београду, ужа научна област Физика кондензоване материје и статистичка физика. Ментор студија је др Игор Станковић, виши научни сарадник Института за физику Београд. У току докторских студија, Миљан Дашић је реализовао шестомесечни научни боравак

у компанији Тојота Мотор Европа у Бриселу, Белгија и започео истраживање триболошких особина јонских течности које је објављено у три научна рада који су део тезе.

1.2. Научна активност

Кандидат Миљан Дашић се у свом научном раду бави проблемима моделовања система са дугодометним интеракцијама са и без геометријског ограничења. Од октобра 2014. године запослен је у Лабораторији за примену рачунара у науци на Институту за физику у Београду и ангажован је на пројекту основних истраживања ОН171017 *Моделирање и нумеричке симулације сложених вишечестичних система* Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије. До сада је објавио један научни рад М21а, три рада М21 и један М22 категорије. Своје резултате је представио на међународним конференцијама у Београду и Љубљани, учествовао је и у школи европске КОСТ акције МП1305 *Текућа материја* у Мадриду.

2. Опис предатог рада

2.1. Основни подаци

Дисертација је урађена под руководством др Игора Станковића, вишег научног сарадника, запосленог на Институту за физику у Београду. Ментор испуњава услове Физичког факултета за руковођење израдом докторске дисертације јер је у научном звању и аутор је великог броја радова из области физике кондензованог стања који су објављени у врхунским међународним часописима и представљени на међународним и домаћим конференцијама. Теза је написана на енглеском језику на 192 стране, не рачунајући насловну страну, захвалнице, сажетак, садржај, биографију аутора и изјаве. У тексту се налази 4 табеле и 66 слика и наведено је 125 референци. Теза је подељена у 4 поглавља и садржи 2 додатка.

2.2. Предмет и циљ рада

Област истраживања коју обухвата ова теза је физика меке и грануларне материје у оквиру шире теме физике кондензоване материје. Кулонова интеракција и магнетна диполна интеракција су две од неколико основних интеракција у физици. Ипак, иако се израчунавање енергије или силе између два наелектрисана или намагнетисана тела може учинити као елементаран проблем, свако усложњавање система додавањем честица и/или њиховим просторним ограничавањем доводи до неинтуитивног понашања система због дугодометне природе ове две интеракције. Поред тога диполна интеракција је и анизотропна што додатно усложњава понашање система. Коначно, треба подсетити, да постоји изоморфизам електричне и магнетне диполне интеракције – који резултате

за дискретне диполе обрађене у овом раду чини значајним и за биолошке системе макромолекула са електричним диполним моментом.

У овој докторској тези моделовани су и испитани просторно ограничени диполни и јонски системи, тачније диполне тубе и хеликси састављени од диполних чврстих сфера и јонске течности у просторном дводимензионалном ограничењу. Да би се избегли ефекти ивица, који су значајни у системима са дугодометним интеракцијама, разматрани су системи са периодичним граничним условима. Коришћени методи изведени су коришћењем сличних математичких алата, и поред интеракције, представљају обједињујући елемент тезе.

Резултати тезе, поред тога што представљају допринос разумевању заједничког утицаја интеракције (диполне или Кулонове) и ограничења на структуру агрегата, значајни су за низ области. У прегледу теме која се односи на уређење диполних честица треба поменути пионирски теоретски рад Јакобса и Бина праћен радом Де Жена и Пинкуса. Ови радови су пружили увид у микроструктуру слободно просторно организованих сферних дипола. У скорије време, основна стања уређених магнетних структура темељно су истражена нумеричким симулацијама. Резултати тог рада показали су да се са повећањем броја честица основно стање добија путем слагања прстена у тубе. Пошто су тубуларне структуре честе у биологији (нпр. микротубуле које формирају цитоскелет) важан је научни проблем разумевања механизма преко којих се градивни блокови, у овом раду представљени најједноставнијим описом - диполним чврстим сферама, организују у структуре и тиме добијају функционалност.

Јонске течности су у овом тренутку интересантне због својих триболошких особина – малог коефицијента трења, негативног притиска паре, и формирања саморганизованих танких слојева који пружају заштиту од хабања. Релативно млада област нанотрибологија односи се на специфичну грану трибологије која проучава феномене трења, подмазивања и хабања на наноскали. Научна дисциплина рачунарске нанотрибологије успостављена је у последњих неколико деценија, а рачунарски ресурси омогућавају примену метода рачунарске нанотрибологије на временске и просторне скале које су интересантне за развој технологије и индустрију. У пракси постоји велики број јонских течности које су потенцијални кандидати као чиста мазива или додаци мазивима. Рачунарске симулације омогућавају разумевање механизма који утичу на квалитет јонске течности као подмазивача – јачине њене интеракције са подлогом, квашења, и вискозности на молекуларном нивоу. Познавање механизма којим молекуларни процеси утичу на особине јонске течности на нивоу једноставних модела битно је за избор јонских течности (постоји јако велики број могућих комбинација) који претходи њиховом експерименталном тестирању и помаже разумевању добијених експерименталних резултата.

Публикације

У овој докторској тези представљени су резултати једног рада објављеног у часопису M21a, три рада у часописима M21, и једног рада у часопису M22 категорије:

- [1] I. Stanković, M. Dašić and R. Messina, “Structure and cohesive energy of dipolar helices”, *Soft Matter* 12, 3056 (2016) [ISSN 1744-6848, IF2016 3.889, M21].
- [2] K. Gkagkas, V. Ponnuchamy, M. Dašić and I. Stanković, “Molecular dynamics investigation of a model ionic liquid lubricant for automotive applications”, *Tribology International* 113, 83 (2017) [ISSN 0301-679X, IF2017 3.246, M21].
- [3] M. Dašić, I. Stanković and K. Gkagkas, “Influence of confinement on flow and lubrication properties of a salt model ionic liquid investigated with molecular dynamics”, *The European Physical Journal E* 41, 130 (2018) [ISSN 1292-8941, IF2017 1.802, M22].
- [4] I. Stanković, M. Dašić, J. A. Otálora and C. García, “A platform for nanomagnetism - assembled ferromagnetic and antiferromagnetic dipolar tubes”, *Nanoscale* 11, 2521 (2019) [ISSN 2040-3372, IF2017 7.233, M21a].
- [5] M. Dašić, I. Stanković and K. Gkagkas, “Molecular dynamics investigation of the influence of the shape of the cation on the structure and lubrication properties of ionic liquids”, *Physical Chemistry Chemical Physics* 21, 4375 (2019) [ISSN 1463-9076, IF2017 3.906, M21].

2.3. Преглед научних резултата изложених у дисертацији

Ова докторска дисертација подељена је у четири поглавља.

У првом поглављу дат је увод у проблематику која је разматрана у тези, кроз осврт на проблеме моделовања система са дугодометним интеракцијама, опис претходног истраживања везаног за диполне чврсте сфере, преглед основних особина јонских течности које их чине интересантним за индустријске примене и експерименталних и теоријских резултата везаних за разумевање механизма који одређују карактеристике подмазивача у процесу трења.

У другом поглављу анализирано је комплексно понашање поларизације унутар хеликоидних и тубуларних структура формираних од диполних чврстих сфера. Истраживани су једнострукно и вишеструко намотани хеликси. Комплексност се огледа у разноврсности структуре локалне поларизације, и у комплексној зависности кохезионе енергије (потенцијалне енергије по честици) од густине паковања и диполне оријентације. Самоорганизација крутих диполних сфера у тубуларне и хеликоидне структуре је актуелна тема у оквиру научне тематике самоорганизације честица у условима просторног ограничења и биофизике.

Чак и за најједноставнији случај, наиме за једнострукно намотани хеликс, добијено је нетривијално понашање када се посматра кохезиона енергија у зависности од површинске густине паковања, при аксијалној компресији. Немонотона зависност енергије од густине паковања је резултат деликатног преплитања утицаја диполне интеракције и дискретне геометрије. Најнижа

кохезиона енергија постигнута је на највишој густини паковања, при којој се намотаји хеликса додирују. Ниска кохезиона енергија значи да је потребно уложити велики рад да би се једна честица издвојила из хеликса. Истовремено, параметар уређења дефинисан као средњи диполни момент по честици такође показује немонотно понашање у зависности од густине паковања. У режиму веома високе површинске густине паковања, где је локално уређење троугаона решетка која одговара дискретним тачкама у параметарској равни одређеној пречником хеликса и његовим нагибом према оси, добијене су веома ниске кохезионе енергије. Утврђено је и да магнетизациони параметар уређења указује на оштру промену у диполној оријентацији структуре, која настоји да се постави паралелно са осом хеликса.

У потрази за структурама са најнижом кохезионом енергијом на одређеном опсегу дијаметара структура упоређене су кохезионе енергије густо пакованих вишеструко намотаних хеликса (као пример узети су двоструко и четвороструко намотани хеликси), као и АВ и ZZ туба направљених слагањем прстенова, односно нити у случају ZZ туба, које су такође специјални случајеви густо пакованих вишеструко намотаних хеликса. Битан резултат је наглашено ниска кохезиона енергија код ZZ туба. У овим структурама, поравнање нити хеликса са његовом осом је микроструктурни узрочник за тако ниску кохезиону енергију. Битан научни допринос истраживања приказаног у овом поглављу је то што је установљено да је коришћењем једноставног модела могуће добити структуре које су упоредиве са реалним структурама виђеним у биологији: микротубулама.

У контексту магнетних структура описана је дегенерација основног магнетног стања у троугаоној и квадратној решетки састављеној од дискретних дипола. Дегенерисана стања су феромагнетна у случају троугаоне и антиферомагнетна у случају квадратне решетке.

У трећем поглављу представљено је истраживање равнотежног и динамичког понашања јонских течности при просторном ограничавању између две равне чврсте плоче (уже - која има улогу контакта и континуалне равне која има улогу подлоге).

Добијено је уређивање јона у непаран укупан број слојева између плоча, као и уређење у близини плоча. Полазећи од случајно распоређених јона на почетку симулација испитан је одзив јонске течности на нормалну компресију реализовану контролисаним спуштањем горње плоче; испитан је одзив јонске течности на латерално померање једне (уже) плоче константном брзином, при одређеном фиксираном притиску на јонску течност. Равнотежно и неравнотежно понашање јонских течности узроковано је њиховим локалним уређењем и обликом молекула јонске течности.

Пошто су симулације и модели јонских течности комплексни, примењен је еволутиван приступ истраживању у коме је у неколико итерација повећавана комплексност модела. Тиме је развијена методологија која је омогућила пуно разумевање утицаја параметара модела на фазно понашање јонске течности у различитим условима (балк, просторно ограничење, и квашење тј. контакт са чврстом равни само са једне стране). Коначни генерички модел јонских течности укључио је: асиметрични катјон који се састоји од позитивно наелектрисане главе и неутралног

репа варијабилне величине и велики сферни негативно наелектрисани анјон. Примећено је да, иако једноставан, овај модел доводи до упечатљивих разлика у равнотежној структури: добијена је једноставна кубична решетка за мали катјонски реп, аморфно стање (слично течности) за симетрични катјонски димер, и уређена структура молекуларних слојева за велики реп.

Коришћењем развијене методологије испитан је утицај молекуларне структуре катјонског димера на одзив три репрезентативне јонске течности на цикличну компресију и при трењу, помоћу симулација неравнотежне молекуларне динамике. Својства три модела јонских течности су упоређена у и ван равнотеже. Еволуција нормалне силе са растојањем међу плочама повезана је са променама у броју и структури слојева јонске течности. Утврђено је да густина унутар процепа има секундарни ефекат на еволуцију нормалне силе. Аналогно експерименталним посматрањима, двослој репова катјона формиран је за велике процепе између плоча у сва три испитивана модела јонских течности. Заједничко обележје свих истраживаних модела јонских течности је формирање фиксних (стабилних) слојева катјона дуж плоча. Формирање фиксног слоја је резултат јаке Ленард-Џонсове интеракције између плоча и јона. Последица стабилности фиксних слојева је нагли пораст нормалне силе при малим размацима између плоча. Нагли пораст нормалне силе је ефекат користан за спречавање контакта између чврстих површина и пратећег хабања. Репови везани за катјоне у фиксном слоју мигрирају са повећањем величине репа. Мали репови чине први слој поред плоча. За симетричне молекуле репови формирају мешовити слој с катјонима, док велики репови обликују мешани слој с анјонима. Истражено је и динамичко понашање танког филма јонске течности при цикличним компресионим покретима горње плоче. Испитивана су два размака између плоча: уски размак, где је анјонски слој подељен на два, и широк размак у којем се формира слој реп до репа. За уски интервал размака уочен је значајан проток јона током цикличног кретања горње плоче. Оштар пад нормалне силе у завршној фази компресије није само последица промене густине због протока, већ је и резултат спајања два анјонска слоја који се одбијају електростатичким Кулоновим силама у један. Анализиран је уложени рад и добијено је да је рад потребан за циклично померање већи за уски процеп, где се број ограничених јонских слојева мења током циклуса. Ипак, ниски хистерезиски губици указују на присуство јаког проклизавања унутар процепа које олакшава проток јона у и ван процепа.

Добијени резултати потврђују да понашање јонских течности у ограниченом простору није директно повезано са њиховим понашањем у балку. То је важан закључак јер показује да је могуће пажљивим дизајном молекуларне структуре јонске течности помирити, обично супротстављене захтеве за ниским трењем и добрим особинама против хабања и тиме решити инжењерски проблем у области нанотрибологије.

У четвртој поглављу дат је преглед добијених резултата и закључак.

Прилог 1

Списак публикација

Рад у међународном часопису изузетних вредности (категорија M21a):

[1] I. Stanković, M. Dašić, J. A. Otálora and C. García,
“A platform for nanomagnetism - assembled ferromagnetic and antiferromagnetic dipolar tubes”,
Nanoscale 11, 2521 (2019) [ISSN 2040-3372, IF2017 7.233].

Радови у врхунским међународним часописима (категорија M21):

[2] M. Dašić, I. Stanković and K. Gkagkas, “Molecular dynamics investigation of the influence of the shape of the cation on the structure and lubrication properties of ionic liquids”,
Physical Chemistry Chemical Physics 21, 4375 (2019) [ISSN 1463-9076, IF2017 3.906].

[3] K. Gkagkas, V. Ponnuchamy, M. Dašić and I. Stanković,
“Molecular dynamics investigation of a model ionic liquid lubricant for automotive applications”,
Tribology International 113, 83 (2017) [ISSN 0301-679X, IF2017 3.246].

[4] I. Stanković, M. Dašić and R. Messina, “Structure and cohesive energy of dipolar helices”,
Soft Matter 12, 3056 (2016) [ISSN 1744-6848, IF2016 3.889].

Радови у истакнутом међународном часопису (категорија M22):

[5] M. Dašić, I. Stanković and K. Gkagkas, “Influence of confinement on flow and lubrication properties of a salt model ionic liquid investigated with molecular dynamics”,
The European Physical Journal E 41, 130 (2018) [ISSN 1292-8941, IF2017 1.802].

Саопштења са међународног скупа штампана у целини (M33):

[6] M. Dašić, “Calculation of Geometrical Packing and Binding Energy of Self-Assembled Magnetic Tubular Structures”, *INFOTEH-JAHORINA*, 18-20 March 2015, Jahorina, Republic of Srpska (BIH)

Саопштења са међународног скупа штампана у изводу (M34):

[7] M. Dašić and I. Stanković, “Theoretical and Experimental Study of Helices Composed of Spherical Dipoles”, *The 19th Symposium on Condensed Matter Physics – SFKM 2015*, 7-11 September 2015, Belgrade, Serbia

[8] M. Dašić, I. Stanković and K. Gkagkas, “Molecular dynamics investigation of a coarse-grained model of ionic liquid under confinement and shear”,
The 10th Liquid Matter Conference – Liquids 2017, 17-21 July 2017, Ljubljana, Slovenia

Прилог 2

ОЦЕНА ИЗВЕШТАЈА О ПРОВЕРИ ОРИГИНАЛНОСТИ ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

На основу Правилника о поступку провере оригиналности докторских дисертација које се бране на Универзитету у Београду и налаза у извештају из програма iThenticate којим је извршена провера оригиналности докторске дисертације „**Modeling the Behaviour of Confined Dipolar and Ionic Systems**” (наслов на српском језику: „**Моделовање понашања просторно ограничених диполних и јонских система**”), аутора Миљана Дашића, констатујем да утврђено подударње текста износи 1%. Овај степен подударности последица је грешака програма и преузетих делова текста из радова кандидата у другим радовима који их цитирају, што је у складу са чланом 9. Правилника.

На основу свега изнетог, а у складу са чланом 8. став 2. Правилника о поступку провере оригиналности докторских дисертација које се бране на Универзитету у Београду, изјављујем да извештај указује на оригиналност докторске дисертације, те се прописани поступак припреме за њену одбрану може наставити.

28.3.2019. године

др Игор Станковић
Виши научни сарадник
Универзитет у Београду – Институт за физику Београд

iThenticate

[Document Viewer](#)

Similarity Index

1%

Modeling the behaviour of confined dipolar and ...

By: Miljan Dašić

As of: Mar 25, 2019 1:42:26 PM

57,737 words - 12 matches - 12 sources

sources:

63 words / < 1% match - Internet from 12-Jun-2018 12:00AM

[documents.mx](#)

51 words / < 1% match - Crossref

[K Gkagkas, V Ponnuchamy. "The impact of coulombic interactions among polar molecules and metal substrates on flow and lubrication properties", Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2017](#)

43 words / < 1% match - Internet from 23-Oct-2011 12:00AM

[www.physics.helsinki.fi](#)

43 words / < 1% match - Crossref

[Bachir Nail, Abdellah Kouzou, Ahmed Hafaiifa, Vicenc Puig. "Optimal Static State-Feedback Controller Design for MIMO LTI Systems Based on Constraints Block Roots and Interior-Point Algorithm: Application to Gas Compressor System", 2018 International Conference on Applied Smart Systems \(ICASS\), 2018](#)

40 words / < 1% match - Internet from 23-Jun-2015 12:00AM

[147.91.68.190](#)

39 words / < 1% match - Internet from 28-Jul-2018 12:00AM

[hal.univ-lorraine.fr](#)

38 words / < 1% match - Internet from 04-Nov-2018 12:00AM

[savremenimaterijali.info](#)

38 words / < 1% match - Internet from 12-Apr-2017 12:00AM

[en.wikipedia.org](#)

36 words / < 1% match - Internet from 04-Feb-2010 12:00AM

[www2.eng.cam.ac.uk](#)

36 words / < 1% match - Crossref

[Konstantinos Gkagkas, Veerapandian Ponnuchamy. "The impact of coulombic interactions among polar molecules and metal substrates on flow and lubrication properties", Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2017](#)

35 words / < 1% match - Internet from 08-Nov-2018 12:00AM

[docplayer.net](#)

35 words / < 1% match - Internet from 17-Jul-2018 12:00AM

[en.wikipedia.org](#)

3. Закључак

На основу изложеног, Комисија закључује да резултати кандидата Миљана Дашића приказани у оквиру ове докторске дисертације представљају изузетно оригиналан и значајан научни допринос у области физике кондензоване материје. Из области дисертације кандидат има 5 објављених радова у врхунским међународним часописима. Сходно томе, комисија предлаже Наставно-научном већу Физичког факултета Универзитета у Београду да одобри јавну одбрану тезе:

„Modeling the Behaviour of Confined Dipolar and Ionic Systems”

(„Моделовање понашања просторно ограничених диполних и јонских система”)

У Београду, 2.4.2019. године

др Игор Станковић

Виши научни сарадник
Универзитет у Београду – Институт за физику Београд

проф. др Милан Кнежевић

Редовни професор
Универзитет у Београду – Физички факултет

проф. др Ђорђе Спасојевић

Редовни професор
Универзитет у Београду – Физички факултет
