

## ИЗВЕШТАЈ О ОЦЕНИ ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

### ПОДАЦИ О КАНДИДАТУ

Презиме, име једног  
родитеља и име Шкундрић, Манојло, Тамара  
Датум и место рођења 21.12.1988., Београд

**Основне студије**

Универзитет Универзитет у Новом Саду  
Факултет Пољопривредни факултет  
Студијски програм Хортикултура  
Звање Дипломирани инжењер пољопривреде  
Година уписа 2007  
Година завршетка 2012  
Просечна оцена 9,22

|                                      |     |  |  |
|--------------------------------------|-----|--|--|
| УНИВЕРЗИТЕТ У НИШУ                   |     |  |  |
| ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ У НИШУ |     |  |  |
| 28.01.2025.                          |     |  |  |
| 01                                   | 145 |  |  |

(Кри мессеј АИИ)

### Мастер студије, магистарске студије

Универзитет Универзитет у Београду  
Факултет Биолошки факултет  
Студијски програм Биологија  
Звање Мастер биолог  
Година уписа 2016  
Година завршетка 2017  
Просечна оцена 9,86  
Научна област Морфологија и систематика биљака  
Наслов завршног рада Компаративна анатомска анализа врста рода *Xeranthemum* L. (Asteraceae) из Србије – таксономски аспект

### Докторске студије

Универзитет Универзитет у Нишу  
Факултет Природно-математички факултет  
Студијски програм Хемија  
Година уписа 2018  
Остварен број ЕСПБ бодова 150  
Просечна оцена 9,92

### НАСЛОВ ТЕМЕ ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

Наслов теме докторске дисертације Енергетски пејзажи и предвиђање структура напредних и био-инспирисаних материјала, испитивање материјала на бази биогених једињења калцијума  
Наслов теме докторске дисертације на енглеском језику Energy landscapes and structure prediction of advanced and bio-inspired materials, investigation of materials based on biogenic calcium compounds  
Име и презиме ментора, звање Др Александра Зарубица, ред. проф.  
Број и датум добијања сагласности за тему докторске дисертације 8/17-01-008/22-017, 23.09.2022.

### ПРЕГЛЕД ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

Број страна 263  
Број поглавља 11  
Број слика (шема, графикана) 93  
Број табела 45

**ПРИКАЗ НАУЧНИХ И СТРУЧНИХ РАДОВА КАНДИДАТА  
који садрже резултате истраживања у оквиру докторске дисертације**

- | Р. бр. | Аутор-и, наслов, часопис, година, број волумена, странице  | Категорија |
|--------|--|------------|
| 1      | <p><b>Škundrić, T., Matović, B., Zarubica, A., Zagorac, J., Tatarko, P. and Zagorac, D.,</b> Structure Prediction and Mechanical Properties of Silicon Hexaboride on Ab Initio Level, <i>Materials</i>, <b>2021</b>, 14(24), p.7887. (IF: 3.748; ISSN: 1996-1944)</p> <p>Силицијум борида представљају веома привлачне индустријске материјале за истраживање због својих изузетних карактеристика, а заједно са другим материјалима на бази борида и карбида имају веома широку примену. Различите SiB фазе су истраживане у прошлости, међутим ограничен број студија је урађен за SiB<sub>6</sub> једињење. У овом раду, вршено је предвиђање структура у чистом SiB<sub>6</sub> применом методе рударења података на <i>ab initio</i> нивоу. Откривено је неколико нових структура за које не постоје претходни експериментални или теоријски подаци. Сваки од структурних кандидата је локално оптимизован на DFT нивоу користећи LDA-PZ и GGA-PBE функционал. Детаљно су испитане механичке и еластичне особине за сваку од теоријски предвиђених и експериментално потврђених структура. Израчунати су и анализирани: однос дуктилност/кртост, карактер везивања, Јангов модул (E), Балк модул (B) и модул смицања (K), укључујући и анизотропију.</p>  | M21        |
| 2      | <p><b>Škundrić, T., Zagorac, D., Schön, J.C., Pejić, M. and Matović, B.,</b> Crystal Structure Prediction of the Novel Cr<sub>2</sub>SiN<sub>4</sub> Compound via Global Optimization, Data Mining, and the PCAE Method, <i>Crystals</i>, <b>2021</b>, 11(8), p.891. (IF: 2.670; ISSN: 2073-4352)</p> <p>Бројне студије показале су да примена силицијума/уградња у CrN може значајно побољшати његове перформансе као заштитне превлаке. Раније експерименталне студије испитивале су само CrSiN у танким филмовима, међутим у оквиру овог рада је представљено прво истраживање Cr-Si-N фаза у саставу Cr<sub>2</sub>SiN<sub>4</sub>. У циљу идентификације могућих модификација, вршено је глобално претраживање енергетског пејзажа (GO) у комбинацији са методом рударења података (DM) и методом замене атома у примитивној ћелији (PCAE). Након <i>ab initio</i> локалне оптимизације, потврђено је неколико обећавајућих структурних кандидата и на LDA-PZ и GGA-PBE нивоима прорачуна. Глобалном оптимизацијом пронађено је шест енергетски повољних структура и пет модификација за које се сматра да су могуће у екстремним условима. Претрага заснована на рударењу података довела је до 9 (девет) кандидата који су одабрани као најрелевантнији, од којих један представља и глобални минимум у Cr<sub>2</sub>SiN<sub>4</sub> систему. Методом замене атома у примитивној ћелији пронађена су такође још три обећавајућа структурна кандидата у овом систему.</p> | M22        |
| 3      | <p><b>Škundrić, T., Schon, J.C., Zarubica, A., Fonović, M., Zagorac, D.</b> Exploring the energy landscape and crystal structures of CrSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>. <i>Zeitschrift fur Anorganische und Allgemeine Chemie</i>, <b>2023</b>, 649 (22), p.e202300130. (IF: 1.1; ISSN: 1521-3749)</p> <p>У досадашњим истраживањима испитиване су Cr-Si-N превлаке, нанокристалне фазе и танки филмови, заједно са теоријски предвиђеним 1D и 2D хетероструктурама, као и 3D кристалне фазе Cr<sub>2</sub>SiN<sub>4</sub> састава. Ово истраживање и рад предвиђа могуће кристалне Cr-Si-N фазе са саставом CrSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>. Примењен је мултиметодски приступ за испитивање енергетског пејзажа овог система, где је глобална оптимизација (GO) комбинована са методом рударења података (DM) и методом замене атома у примитивној ћелији (PCAE). Локална оптимизација структурних кандидата урађена је на DFT нивоу користећи GGA-PBE и LDA-PZ апроксимације ради поређења добијених резултата. Од десет енергетски повољних структурних кандидата пронађених у CrSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> хемијском систему већина испољава моноклиничну симетрију, али са разноврсним структурним карактеристикама, од структура сличних зеолиту, до политипског понашања. Такође, за пронађене модификације израчунати су модули стишљивости у опсегу притисака до 10 GPa.</p>  | M23        |
| 4      | <p><b>Škundrić, T., Zagorac, D., Zarubica, A. and Matović, B.,</b> Theoretical investigation of mollusk shells: Energy landscape exploration of CaCO<sub>3</sub> polymorphs and element substitution: A short review. <i>Advanced Technologies</i>, <b>2021</b>, 10(1), pp.73-80. (IF<sub>5</sub>: 0.774; ISSN: 2406-2979)</p>   | M24        |

Због изузетних својстава које постижу при амбијенталним условима и са доста ограниченим саставним елементима, шкољке мекушаца су веома привлачни природни биоконпозити који се користе као инспирација за нове напредне материјале. Калцијум-карбонат који је међу најраспрострањенијим биоминералима, мекушци користе и као градивни материјал који чини 95-99% њихове љуштуре. У оквиру испитивања полиморфа калцијум-карбоната присутних у љуштурама, рађена су различита теоријска и експериментална испитивања. Међутим, постоји веома мало истраживања енергетског пејзажа биогеног калцијум-карбоната који нам може пружити информације о слободним енергијама већ познатих, као и новооткривених могућих структура. У раду су приказане различите методе прорачуна које се примењују у циљу испитивања структурних, механичких, еластичних или вибрационих карактеристика, као и у циљу предвиђања нових могућих структура биогених калцијум-карбоната.

**Škundrić, T., Zagorac, D., Pejić, M., Zagorac, J., Matović, B.** DFT study of the  $\text{Cr}_2\text{SiN}_4$  under extreme pressure conditions, *Journal of Innovative Materials in Extreme Conditions*, **2022**, 3 (1), pp. 9-18.

Недавно предвиђене  $\text{Cr}_2\text{SiN}_4$  фазе даље су истражене применом *ab initio* метода како би се истражило њихово понашање у екстремним условима притисака. Термодинамичке функције за неколико различитих модификација су израчунате за опсег притисака од 0 до 10 GPa користећи GGA-PBE функционал. Детаљна анализа механичких својстава под притиском извршена је коришћењем квантно-хемијског програма CRYSTAL. Промена запремине, енергије и модула запремине са порастом притиска разматрана је за сваку од ових фаза истражених у оквиру овог истраживања. Највећа вредност запреминског модула налази се у модификацији равнотежног спинела који показује највећи капацитет отпорности на промену запремине под притиском. Како би овај материјал потенцијално могао имати веома широку индустријску и технолошку примену, ови резултати би могли бити од велике важности, јер пружају бољи увид у ново једињење  $\text{Cr}_2\text{SiN}_4$ , а посебно у његово понашање у екстремном окружењу.

**Škundrić, T., Matović, B., Zarubica, A., Chudoba, D., Zagorac, D.** Data mining *ab initio* study of gypsum and  $\text{CaCO}_3$  modifications at standard and extreme conditions, *Journal of Innovative Materials in Extreme Conditions*, **2023**, 4 (1), pp. 38-51.

Калцијум-карбонат и гипс су веома чести и широко распрострањени минерали који се широко користе у многим областима. Међутим, да би се истражило њихово понашање у екстремним условима притисака и температуре, примењена је метода рударења података на *ab initio* нивоу. У циљу испитивања структурне стабилности и истраживања различитих фаза калцијум-карбоната и гипса у овим екстремним условима, најинтересантније модификације су подвргнуте DFT оптимизацији. Прорачуни локалне оптимизације урађени су у квантно-хемијском програму CRYSTAL17. Приказане су тоталне енергије различитих фаза гипса, а чини се да међу фазама калцита, фаза Калцит I ( $\text{CaCO}_3$  I) има најнижу израчунату укупну енергију користећи три различита функционала, што је у складу са експерименталним подацима. Свака од модификованих фаза ових минерала је разматрана и представљена у овом раду. Због веома широке индустријске и технолошке примене ових природних минерала, даља истраживања би могла бити од великог значаја, посебно њихове перформансе у екстремним условима.

**Škundrić, T., Zagorac, D., Pejić, M., Jovanović, D., Zagorac, J., Fonović, M., Matović, B.** Theoretical modifications of  $\text{CrSi}_2\text{N}_4$  at extreme conditions, *Journal of Innovative Materials in Extreme Conditions*, **2024**, vol. 5 (2), pp. 92-105 (ISSN: 2738-0882)

Захваљујући многим жељеним својствима и потенцијално веома широкој примени у индустрији, систем Cr-Si-N је веома привлачан за истраживање. До данас је урађено неколико студија у вези са танким филмовима или премазима, међутим, мало студија је урађено о Cr-Si-N у кристалном стању. Претходно је истраживан овај систем у два различита састава,  $\text{Cr}_2\text{SiN}_4$  и  $\text{CrSi}_2\text{N}_4$ , при чему је пронађено неколико модификација. Истражујући енергетски пејзаж  $\text{CrSi}_2\text{N}_4$ , десет модификација је предвиђено и представљено у нашем претходном истраживању. У циљу даљег испитивања овог система, примењен је мултиметодски приступ у истраживању фаза које је могуће наћи у екстремним условима средине. Комбиновањем глобалне претраге енергетског пејзажа са рударењем података и методом атомске замене у примитивној ћелији, предвиђено је неколико структурних кандидата који би могли постојати у екстремним условима. Локална оптимизација структурних кандидата извршена је на DFT нивоу коришћењем

M54

M54

M54

GGA и LDA апроксимација ради поређења резултата.

**НАПОМЕНА:** уколико је кандидат објавио више од 3 рада, додати нове редове у овај део документа

## ИСПУЊЕНОСТ УСЛОВА ЗА ОДБРАНУ ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

Кандидат испуњава услове за оцену и одбрану докторске дисертације који су предвиђени Законом о високом образовању, Статутом Универзитета и Статутом Факултета.

ДА НЕ

Кандидат је положио све испите на Докторским академским студијама – Хемија и има објављене научне радове из области и теме докторске дисертације у часописима категорије M21 (1 рад), M22 (1 рад), M23 (1 рад), односно M24 (1 рад), као и три рада из категорије M54, при чему је остварен индекс научне компетентности већи од 6 (шест) поена према критеријумима ресорног Министарства. Првопотписани је аутор свих напред наведених радова међу којима је и научни рад објављен у часопису чији је издавач Факултет Универзитета у Нишу.

## ВРЕДНОВАЊЕ ПОЈЕДИНИХ ДЕЛОВА ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

Кратак опис појединих делова дисертације (до 500 речи)

У уводном делу, у складу са усвојеном темом докторске дисертације, обрађени су следећи поднаслови: напредни материјали (материјали на бази нитрида са хромом и силицијумом, материјали из групе силицијум-борида, биоматеријали и био-инспирирани материјали), енергетски пејзажи и предвиђање структура, основи теоријских метода (Шредингерова једначина, Борн-Опенхајмер апроксимација, Хартри-Фок теорија, Теорија функционала густине, Базични сетови), методе предвиђања структуре и структурне оптимизације (глобална оптимизација, симулирано каљење, метода рударења података, метода атомске замене у примитивној ћелији), локална оптимизација, кристалографска анализа и визуализација структура. Такође, дат је уводни део везан за испитивање материјала на бази биогених једињења калцијума, где су обрађени следећи поднаслови: добијање биодизела на бази различитих биолошких материјала, теоријски приступ поменутом процесу, физичко-хемијске карактеристике и стандарди квалитета биодизела, сировине за производњу биодизела (традиционалне сировине за производњу биодизела, алтернативне сировине, отпадна (коришћена) уља), преглед катализатора за процес добијања биодизела, примена хетерогених катализатора у процесу добијања биодизела и трансестерификација.

У експерименталном делу детаљно је описана припрема и модификација материјала и њихово даље процесирање у циљу добијања катализатора. За све припремљене узорке испитана су структурна својства применом Рендгенске структурне анализе (XRD), као и карактеризација порозности материјала која је урађена Нискотемпературном адсорпцијом и десорпцијом (течног) азота (BET), док су морфолошка својства катализатора испитана Скенирајућом електронском микроскопијом (SEM). Инфрацрвена спектроскопија са Фуријеовом трансформацијом (FTIR) коришћена је за испитивање морфолошких својстава катализатора, док су термијска својства испитана Термогравиметријском и Диференцијалном термијском анализом. Детаљно су описане реакције добијања алтернативног горива уз коришћење припремљених катализатора, као и поступак анализе добијеног материјала помоћу Гасне хроматографије са масеном детекцијом (GC-MS).

У оквиру резултата и дискусије испитивања напредних материјала представљени су најпре резултати испитивања новог Cr<sub>2</sub>SiN<sub>4</sub> једињења мултиметодским приступом (GO, DM, PCAE), а потом и упоредна анализа пронађених кандидата, њихова оптимизација на *ab initio* нивоу, као и криве зависности енергије од запремине E(V) и енталпије од притиска H(p). Потом су представљени резултати испитивања новог CrSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> једињења, које је такође испитивано мултиметодским приступом, као и упоредна анализа пронађених структура и њихова *ab initio* оптимизација. Поред израчунатих E(V) крива за све пронађене CrSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> фазе, приказана су и њихова механичка својства при стандардним и повишеним притисцима. Коначно, дати су резултати испитивања ових једињења у екстремним условима. Истраживање једињења SiB<sub>6</sub> урађено је помоћу PCAE и DM методе, а за пронађене структуре су поред упоредне анализе и *ab initio* оптимизације, дати и резултати испитивања еластичних и механичких својстава ових фаза.

Приликом дискусије испитивања једињења калцијума биогеног порекла приказани су резултати карактеризације некалцинисаних материјала, као и калцинисаних узорака CaCO<sub>3</sub> биогеног порекла (XRD, SEM, BET, FTIR, DTA), њихове примене као катализатора у реакцијама добијања алтернативног горива, а потом и резултати анализе добијених производа реакције. Такође, методом рударења података пронађене су фазе калцијум-карбоната и приказана упоредна анализа експерименталних и теоријских структура.

На основу добијених резултата долази се до закључка да је истраживање енергетских пејзажа Cr<sub>2</sub>SiN<sub>4</sub> и CrSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> једињења резултирало великим бројем структурних кандидата и да је довело до тога да је предлошен велики број могућих модификација које би могле бити погодне за многе технолошке

примене. Такође, испитивање SiB<sub>6</sub> једињења довело је до 4 (четири) финалне структуре SiB<sub>6</sub> при чему су поред додатног испитивања већ постојећих структура, дати предлози за нове структуре које би могле имати широку технолошку примену. Испитивана биогена једињења калцијума показала су потенцијал за примену у катализи реакције трансестерификације и да би могли заменити традиционалне, синтетичке катализаторе. Тиме се отвара нова перспектива за развој одрживих и еколошки прихватљивих технологија у производњи биогорива.

### **ВРЕДНОВАЊЕ РЕЗУЛТАТА ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ**

Ниво остваривања постављених циљева из пријаве докторске дисертације *(до 200 речи)*

У оквиру докторске дисертације, остварени су следећи постављени циљеви:

-Применом различитих теоријских прорачуна, пронађене су стабилне модификације у новим неистраженим системима, као и нове могуће структуре у релативно/делимично познатим системима у циљу испитивања могућности добијања нових материјала са напредним карактеристикама.

-Дефинисани су и оптимизовани услови синтезе у циљу добијања био-инспирираних материјала из лако доступних, обновљивих, јефтених био-материјала одговарајућим методама припреме материјала, те њихова комплетна карактеризација и примена, као и тестирање тих материјала у добијању/(производњи) алтернативног горива као новог, обновљивог извора енергије.

Вредновање значаја и научног доприноса резултата дисертације *(до 200 речи)*

Користећи различите квантно-хемијске методе, откривене су стабилне модификације у новим, недовољно истраженим системима као што је Cr-Si-N, као и нове могуће структуре у релативно познатим системима као што је Si-B. Сматра се да ове новооткривене модификације могу бити погодне за различите технолошке и индустријске примене, а истражено је и како се ови материјали понашају у екстремним условима средине.

Такође, у циљу испитивања материјала на бази биогених једињења калцијума, материјали су припремљени једноставном, брзом и економски исплативом методом коришћењем лако доступних и обновљивих био-материјала. Након тога, испитана је могућност њихове примене као катализатора у реакцијама добијања алтернативног горива. Ово представља нову перспективу за развој одрживих и еколошки прихватљивих технологија у производњи биогорива.

Оцена самосталности научног рада кандидата *(до 100 речи)*

У току израде докторске дисертације, кандидат је показао изразиту самосталност у планирању и извршавању експерименталних и теоријских задатака, прикупљању података, тумачењу резултата и писању радова, као и самој изради докторске дисертације.

### **ЗАКЉУЧАК** *(до 100 речи)*

На основу свега напред наведеног, на основу вредновања делова докторске дисертације и остварених резултата докторске дисертације, те публикованих научних радова кандидата, Комисија закључује да кандидат Тамара Шкундрић задовољава све услове предвиђене Законом о високом образовању, Статутом Универзитета у Нишу и Статутом Природно-математичког факултета у Нишу за одбрану докторске дисертације. Због тога, Комисија са задовољством предлаже Наставно-научном већу Природно-математичког факултета у Нишу да одобри кандидату Тамари Шкундрић јавну одбрану докторске дисертације под називом: "Енергетски пејзажи и предвиђање структура напредних и био-инспирираних материјала, испитивање материјала на бази биогених једињења калцијума".



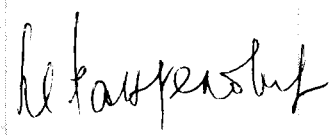

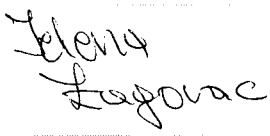
## КОМИСИЈА

Број одлуке Научно-стручног већа за природно математичке науке о именовану Комисије

НСВ 8/17-01-001/25-019

Датум именовања Комисије

20.01.2025.

| Р. бр. | Име и презиме, звање   | Потпис   |
|--------|--|--|
| 1.     | др Дејан Загорац, научни саветник<br>председник<br>НО: Хемија,<br>УНО: Хемија<br><small>(Паралелност)</small> <small>(Установе у којој је запослен)</small><br>Институт за нуклеарне науке "Винча"<br>Универзитета у Београду      |   |
| 2.     | др Владимир Жиких, ред. проф.<br>члан<br>НО: Биологија,<br>УНО: Зоологија<br><small>(Паралелност)</small> <small>(Установе у којој је запослен)</small><br>Природно-математички факултет у Нишу                                    |   |
| 3.     | др Марјан Ранђеловић, ред. проф.<br>члан<br>НО: Хемија,<br>УНО: Примењена и<br>индустријска Хемија<br><small>(Паралелност)</small> <small>(Установе у којој је запослен)</small><br>Природно-математички факултет у Нишу           |   |
| 4.     | др Александра Зарубица, ред. проф.<br>ментор, члан<br>НО: Хемија,<br>УНО: Примењена и<br>индустријска Хемија<br><small>(Паралелност)</small> <small>(Установе у којој је запослен)</small><br>Природно-математички факултет у Нишу |   |
| 5.     | др Јелена Загорац, виши научни сарадник<br>члан<br>НО: Хемија,<br>УНО: Хемија<br><small>(Паралелност)</small> <small>(Установе у којој је запослен)</small><br>Институт за нуклеарне науке "Винча"<br>Универзитета у Београду      |  |

Датум и место: