

НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ

Предмет: Извештај о урађеној докторској дисертацији кандидаткиње Гордане Д. Марковић.

Одлуком бр. 2026-35/367 од 27. августа 2026. године, именовани смо за чланове Комисије за оцену докторске дисертације кандидаткиње Гордане Д. Марковић под насловом „Развој и дизајн нових легура титана применом напредних рачунарских метода” (Development and design of new titanium alloys using advanced computational methods).

После прегледа достављене дисертације и других пратећих материјала и разговора са кандидаткињом, Комисија је сачинила следећи

ИЗВЕШТАЈ

1. УВОД

1.1. Хронологија одобравања и израде дисертације

12. марта 2025. Кандидаткиња подноси Факултету пријаву теме за израду докторске дисертације под називом: „Развој и дизајн нових легура титана применом напредних рачунарских метода” (Development and design of new titanium alloys using advanced computational methods).

20. марта 2025. Наставно-научно веће Технолошко-металуршког факултета на седници доноси Одлуку бр. 35/40 о именовању Комисије за оцену подобности теме и кандидаткиње за израду докторске дисертације, у саставу: др Жељко Камберовић, редовни професор Универзитета у Београду, Технолошко-металуршког факултета, др Вељко Ђокић, научни саветник Иновационог центра Технолошко-металуршког факултета, др Стефан Дикић, доцент Универзитета у Београду, Технолошко-металуршког факултета, др Гвозден Јовановић, научни сарадник Института за технологију нуклеарних и других минералних сировина, др Франциско Хавијер Домингез Гутијерез (Francisco Javier Dominguez Gutierrez), ванредни професор Националног центра за нуклеарна истраживања, Отвоцк, Пољска.

24. априла 2025. Наставно-научно веће Технолошко-металуршког факултета на седници доноси Одлуку бр. 35/90 о прихватању Реферата Комисије за оцену подобности теме и кандидаткиње за израду докторске дисертације, и за менторе именује др Васа Манојловић, ванредног професора Технолошко-металуршког факултета и др Јовану Ружић, вишу научну сарадницу Института за нуклеарне науке „Винча“ – Института од националног значаја за Републику Србију.

27. маја 2025. Веће научних области техничких наука Универзитета у Београду на седници доноси Одлуку бр. 61206/2-25 о давању сагласности на одлуку Наставно-научног већа Технолошко-металуршког факултета о прихватању теме докторске дисертације кандидаткиње Гордане Д. Марковић под називом „Развој и дизајн нових легура титана применом напредних рачунарских метода” (Development and Design of New Titanium Alloys Using Advanced Computational Methods) и потврђивању др Васа Манојловића, ванредног професора Технолошко-металуршког факултета, и др Јоване Ружић, више научне сараднице Института за нуклеарне науке „Винча” – Института од националног значаја за Републику Србију, за менторе.

27. августа 2026. Наставно-научно веће Технолошко-металуршког факултета на седници доноси Одлуку бр. 2026-35/367 о именовању Комисије за оцену докторске дисертације, у саставу: др Жељко Камберовић, редовни професор Универзитета у Београду, Технолошко-металуршког факултета, др Стефан Дикић, доцент Универзитета у Београду, Технолошко-металуршког факултета, др Гвозден Јовановић, научни сарадник Института за технологију нуклеарних и других минералних сировина, др Франциско Хавијер Домингез Гутијерез (Francisco Javier Dominguez Gutierrez), ванредни професор Националног центра за нуклеарна истраживања, Отвоцк, Пољска.

1.2. Научна област дисертације

Истраживања у оквиру ове дисертације припадају научној области Технолошко инжењерство, у оквиру уже научне области Металуршко инжењерство, за коју је матична установа Технолошко-металуршки факултет Универзитета у Београду. Ментори др Васо Манојловић, ванредни професор на Катедри за металуршко инжењерство Технолошко-металуршког факултета Универзитета у Београду, и др Јована Ружић, виша научна сарадница Института за нуклеарне науке „Винча” – Института од националног значаја за Републику Србију Универзитета у Београду, на основу објављених научних публикација и досадашњег научног искуства, компетентни су да руководе израдом ове докторске дисертације.

1.3. Биографски подаци о кандидаткињи

Гордана Марковић рођена је 21. априла 1997. године у Београду. Основну школу завршила је у Војки 2012. године, а гимназију општег смера у Старој Пазови 2016. године. Основне академске студије на студијском програму Инжењерство материјала уписала је школске 2016/17. године на Технолошко-металуршком факултету Универзитета у Београду, а завршила их је 30. септембра 2021. године са просечном оценом 8,75. Дипломски 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 завршила је 30. септембра 2022. године са просечном оценом 10,00, одбранивши мастер рад под насловом „Предвиђање механичких својстава биокомпатибилних легура титана применом машинског учења” под менторством проф. др Васа Манојловића. Докторске академске студије на студијском програму Металуршко инжењерство уписала је школске 2022/23. године на Технолошко-металуршком факултету Универзитета у Београду. Од новембра 2022. године запослена је у Институту за технологију нуклеарних и других минералних сировина (ИТНМС) у Београду, најпре у звању истраживача-приправника, а од августа 2025. године у звању истраживача-сарадника. Њена научноистраживачка делатност усмерена је на примену савремених рачунарских метода, као што су машинско учење, теорија функционалне густине (DFT) и молекулска динамика (MD), у дизајну и карактеризацији легура титана побољшаних механичких својстава. Кандидаткиња активно учествује у међународним истраживачким пројектима и чланица је четири COST акције: CA22143 – European Materials Informatics Network (EuMINe), CA21121 – European Network for the Mechanics of Matter at the Nano-Scale (MecaNano), CA22154 – Data-driven Applications towards the Engineering of functional Materials (DAEMON) и CA22123 – European Materials Acceleration Center for Energy (EU-MACE). Од новембра 2024. године чланица је тима за моделовање у оквиру међународног пројекта INNUMAT (Innovative Structural Materials for Fission and Fusion), под вођством др Франциска Хавијера Домингеса Гутијереса. У оквиру COST акције CA21121 реализовала је краткорочну научну мисију (STSM) у Националном центру за нуклеарна истраживања (NCBJ) у Отвоцку, Пољској, од 6. до 20. јула 2025. године, уз истраживачку посету Универзитету AGH у Кракову. Од 1. априла до 31. маја 2026. године боравила је на двомесечном истраживачком усавршавању у лабораторији TechLab високе школе Mines Nancy Универзитета у Лорени, у Француској, у области примене великих језичких модела за издвајање научних података и знања у науци о материјалима. У септембру 2024. године учествовала је на школи EuMINe 1st Training School у Београду, посвећеној примени дигиталних алата и вештачке интелигенције у информатици материјала, а у мају 2026. године на школи AccelMAPs (Accelerating Energy Materials Development: From Legacy Labs to Material Acceleration Platforms) организованој у оквиру COST акције CA22123, одржаној на Instituto Superior Técnico у Лисабону, Португалија. Добитница је друге награде за најбољи студентски рад на конференцији BECCSI 2025 у Београду. Била је чланица организационог тима међународне конференције 6th Metallurgical & Materials Engineering Congress of South-East Europe (MMECSEE 2025) и активна је чланица Савеза металурга Србије. У истраживачком раду користи симулационе пакете VASP и LAMMPS и програмски језик Python. Течно говори енглески језик, а поседује и сертификат о знању шпанског језика на нивоу B1.

2. ОПИС ДИСЕРТАЦИЈЕ

2.1. Садржај дисертације

Докторска дисертација кандидаткиње Гордане Д. Марковић, мастер инж. металургије, под називом „Развој и дизајн нових легура титана применом напредних рачунарских метода” (Development and

Design of New Titanium Alloys Using Advanced Computational Methods), написана је на енглеском језику на 111 страна, од којих су 103 нумерисане, садржи 52 слике, 20 табела и 124 литературна навода. Наведена докторска дисертација садржи поглавља следећих назива: Introduction (Увод), Background and Literature Review (Преглед литературе), Materials and Methods (Материјали и методе), Results and Discussion (Резултати и дискусија), Conclusions (Закључци) и References (Литература), као и биографију ауторке, захвалницу и сажетке на српском и енглеском језику. Дисертација такође садржи прилоге са Изјавом о ауторству, Изјавом о истовестности штампане и електронске верзије докторског рада и Изјавом о коришћењу, као и оценом извештаја о провери оригиналности докторске дисертације. Наведена докторска дисертација по свом облику и садржају испуњава прописе и стандарде за докторске дисертације које се бране на Универзитету у Београду.

2.2. Кратак приказ појединачних поглавља

У поглављу Увод размотрен је значај легура титана као металних биоматеријала, са посебним освртом на биокompatibilност, отпорност према корозији и механичку компатибилност имплантата и коштаног ткива. Објашњен је ефекат заштите од оптерећења (stress shielding), који настаје услед разлике у крутости између имплантата и кости и представља основну мотивацију за развој легура титана са сниженим Јанговим модулом еластичности, чиме се смањује разлика у крутости између имплантата и коштаног ткива. У уводном поглављу формулисани су предмет и циљеви истраживања: формирање базе експерименталних података из литературе, развој модела машинског учења за предвиђање механичких својстава, рачунарска дизајн нових састава у систему Ti–Mo–Sn и њихова експериментална провера. Поглавље Преглед литературе (Background and Literature Review) подељено је у три целине: Кристална структура и фазне трансформације у титану, Механизми деформације у легурама титана и Приступи дизајну легура титана. У првој целини описане су α и β фазе титана, температура β -преображаја (β -transus temperatura) и улога легирајућих елемената у фазној стабилности. У другој целини обрађени су механизми клизања у структури α -титана, двојниковање и фазне трансформације, веза између структуре и механичких својстава, као и атомистички поглед на механизме деформације α -титана. У трећој целини дат је преглед емпиријских и полуемпиријских параметара дизајна (молибденски еквивалент, однос броја електрона и атома, e/a , и d -електронски концепт), високопропусног експерименталног приступа развоју легура, као и рачунарских приступа: CALPHAD методологије, прорачуна из првих принципа и дизајна легура заснованог на машинском учењу. У поглављу Материјали и методе описани су формирање базе података о биокompatibilним легурама титана на основу литературних извора, претходна обрада и пречишћавање података, формирање дескриптора заснованих на хемијском саставу и методологија машинског учења са унакрсном валидацијом, којом се спречава пренос информација између скупа за обучавање и скупа за проверу и смањује ризик од преприлагођавања модела. Описан је поступак рачунарског дизајна претрагом простора хемијских састава у систему Ti–Mo–Sn, а затим и експерименталне методе: електролучно топљење одабраних легура, мерење густине Архимедовом методом, фазна и микроструктурна карактеризација (XRD, SEM и EDS), EBSD анализа, наноиндентација, квантитативна анализа α -ламеларне микроструктуре помоћу софтвера MIPAR, термодинамички прорачуни у програму PANDAT са термодинамичком базом PanHEA и атомистичке симулације наноиндентације монокристалног α -титана у програму LAMMPS. Поглавље Резултати и дискусија обухвата статистичку анализу формиране базе и физичку интерпретацију изведених дескриптора, избор и верификацију скупа података за моделовање, предвиђање механичких својстава и анализу одзива модела. Модел заснован на алгоритму случајних шума за предвиђање Јанговог модула, развијен на основу 240 експерименталних записа, остварио је коефицијент детерминације 0,417 и средњу апсолутну грешку од 11,50 GPa при валидацији груписаној по публикацијама, при чему су се енергија d -орбитале и дескриптори стабилности β фазе издвојили као најзначајнији. Ради поређења, при уобичајеној насумичној подели података исти модел остварио је коефицијент детерминације 0,597 и средњу апсолутну грешку од 8,93 GPa, што показује да насумична подела прецењује тачност модела. Претрагом композиционог простора издвојена је област снижених вредности модула и одабране су легуре Ti–6,2Mo– x Sn ($x = 5, 10$ и 15 мас.%), које су затим синтетисане и окарактерисане. Приказани су резултати хемијске и фазне анализе, мерења густине, EBSD карактеризације и наноиндентације, чији су резултати показали снижење Јанговог модула са 101,02 GPa за легуру Ti–6,2Mo на 79,26, 85,31 и 83,65 GPa за легуре са 5, 10 и 15 мас.% Sn. CALPHAD анализом дат је термодинамички контекст фазне стабилности, док је атомистичким симулацијама наноиндентације објашњена зависност локалног модула од кристалографске оријентације α -ламела. У завршном делу поглавља извршено је поређење

експерименталних резултата са предвиђањима модела и анализирани су узроци одступања и ограничења композиционог приступа. Резултати потврђују применљивост машинског учења за избор састава легура са циљаним механичким својствима, при чему микроструктура и поступак израде остају значајни чиниоци који одређују коначна својства материјала.

3. ОЦЕНА ДИСЕРТАЦИЈЕ

3.1. Савременост и оригиналност

Докторска дисертација бави се актуелном темом развоја легура титана чији је Јангов модул еластичности близак модулу еластичности кости, чиме се ублажава ефекат заштите од оптерећења (енгл. stress shielding effect) и смањује последична ресорпција коштаног ткива у околини имплантата. Истраживање припада области металних биоматеријала. Истовремено, дисертација припада области дизајна материјала заснованог на подацима, која се у последњој деценији убрзано развија у оквиру науке о материјалима. Примена машинског учења у развоју нових легура све је заступљенија у савременим истраживањима. О актуелности теме сведочи и структура коришћене литературе: приближно две трећине наведених радова објављено је од 2016. године, а готово половина од 2021. године, при чему су обухваћени и радови објављени 2026. године. Оригиналност дисертације огледа се у неколико аспеката. Формирана је обимна и критички пречишћена база експерименталних података о биокомпатибилним легурама титана, уз примену строгих критеријума у погледу упоредивости мерених величина и поступака израде. База је јавно доступна и представља користан истраживачки ресурс и основу за њено даље проширење и допуну. Критичка анализа прикупљених података и досадашњих резултата истовремено омогућава формулисање препорука за будућа истраживања, посебно у погледу података и експерименталних параметара које је потребно доследно приказивати у радовима из ове области како би резултати били упоредиви и погодни за примену у моделима машинског учења. За процену тачности модела примењена је валидација заснована на груписању података према изворним публикацијама и упоређена је са уобичајеном насумичном поделом података. На тај начин добијена је реалнија оцена способности модела да предвиди својства легура на основу података из нових, претходно невидених извора. Овакав методолошки приступ и даље се ретко примењује у области предвиђања својстава легура титана. У дисертацији је спроведен целовит циклус дизајна материјала: од формирања базе података и развоја модела, преко рачунарске претраге композиционог простора и избора састава у тернарном систему Ti–Mo–Sn, до синтезе, карактеризације и квантитативног поређења експерименталних резултата са предвиђањима модела. Посебан допринос дисертације представља повезивање резултата добијених на различитим нивоима структуре материјала. Локалне вредности модула еластичности, одређене наноиндентацијом, повезане су са кристалографском оријентацијом утврђеном EBSD анализом и квантитативним параметрима α -ламеларне микроструктуре. Добijени резултати разматрани су и у ширем термодинамичком контексту, заснованом на CALPHAD прорачунима. Најзад, дисертацију одликује и критичка анализа ограничења примењеног приступа, укључујући квантификовање утицаја појединачних литературних извора на предвиђања модела. Тиме је омогућен објективнији приступ дизајну материјала, као и јасније разграничење између онога што модел може да предвиди на основу хемијског састава и утицаја микроструктуре и поступка израде, који нису у потпуности обухваћени коришћеним подацима.

3.2. Осврт на референтну и коришћену литературу

При изради ове докторске дисертације кандидаткиња је користила 124 литературна извора. Поред најновијих научних радова из области дизајна легура титана и примене машинског учења у науци о материјалима, укључујући и радове објављене 2025. и 2026. године, коришћене су стручне књиге, монографије и поглавља из области науке о материјалима, металургије титана и биоматеријала, прегледни радови који приказују развој ових области током протеклих деценија, фундаментална литература из области фазних трансформација, механизма деформације и наноиндентације, као и методолошка литература која се односи на примењене рачунарске алате и термодинамичке прорачуне. Коришћене су и публикације кандидаткиње и њених сарадника у којима су претходно испитивани поједини аспекти формирања базе података и предвиђања механичких својстава биокомпатибилних легура титана. Наведени извори обухватају експерименталне резултате, њихову анализу и тумачење, изведене закључке и теоријске основе примењених метода испитивања. Кандидаткиња је допринела проширивању постојећих сазнања о примени машинског учења у дизајну биокомпатибилних легура

титана, са посебним нагласком на повезивање хемијског састава и композиционих дескриптора са Јанговим модулом еластичности, као и на експерименталну проверу предвиђања и испитивање улоге микроструктуре у коначним својствима легура система Ti–Mo–Sn. На основу пописа коришћене литературе може се закључити да кандидаткиња адекватно познаје предметну област и актуелно стање истраживања у свету, при чему је приближно две трећине наведених извора објављено у последњих десет година. Резултати приказани у дисертацији у складу су са савременим истраживањима у области развоја биокompatibilних легура титана и дизајна материјала заснованог на подацима.

3.3. Опис и адекватност примењених научних метода

Истраживање у оквиру ове дисертације засновано је на комбиновању рачунарских и експерименталних метода. База података формирана је систематским прикупљањем експерименталних резултата из литературе, уз строге критеријуме укључивања којима је обезбеђена истородност мерене величине и поступка израде, тако да скуп података за моделовање Јанговог модула обухвата 240 експерименталних записа из 77 публикација. Улазне величине модела чини 30 карактеристика: садржаји 12 легирајућих елемената, 16 композиционих дескриптора изведених из електронских и атомских параметара легирајућих елемената и две категоријске променљиве. За предвиђање својстава упоређено је више алгоритама машинског учења, међу којима је модел заснован на алгоритму случајних шума одабран као најпогоднији. Тачност модела оцењена је унакрсном валидацијом са подацима груписаним по публикацијама, чиме је смањена могућност прецењивања тачности услед сродности података из истог извора и добијена реалнија оцена способности модела да предвиди својства легура на основу података из нових извора. Значај појединачних дескриптора одређен је пермутационом анализом, док је удео варијансе повезан са припадношћу легура појединим системима легура квантификован. Рачунарски дизајн нових састава изведен је претрагом композиционог простора система Ti–Mo–Sn, у којем су садржаји Мо и Sn варијани од 0 до 16 мас.% са кораком од 0,2 мас.%, чиме је оцењен 6561 кандидатски састав и одабрана серија легура Ti–6,2Mo–xSn ($x = 5, 10$ и 15 мас.%). Одабране легуре добијене су електролучним топљењем, хомогенизоване на $1000\text{ }^{\circ}\text{C}$ током 2 h у евакуисаним кварцним цевима, каљене у води и хладно ваљане уз редукцију дебљине од приближно 20%. Густина је одређена Архимедовом методом, фазни састав рендгенском дифракционом анализом (XRD), а хемијска хомогеност и микроструктура скенирајућом електронском микроскопијом са енергетски дисперзивном спектроскопијом (SEM/EDS). Кристалографска оријентација α -ламела одређена је EBSD анализом, док су њихова морфологија и расподела оријентација квантификоване обрадом микрографија у софтверу MIPAR, чиме је омогућено објективно одређивање микроструктурних параметара. Редуковани модул еластичности и тврдоћа одређени су наноиндентацијом, а вредности Јанговог модула израчунате су применом Оливер–Фарове методе. Комбиновањем наноиндентације са EBSD анализом омогућено је директно повезивање локалног модула са кристалографском оријентацијом. Термодинамички контекст фазне стабилности добијен је CALPHAD прорачунима бинарних дијаграма Ti–Mo и Ti–Sn и изотермалних пресека тернарног система Ti–Mo–Sn на 1000 и $100\text{ }^{\circ}\text{C}$, изведеним у програму PANDAT са базом PanHEA. Механизми оријентационе зависности локалних својстава испитани су атомистичким симулацијама наноиндентације монокристалног α -титана у програму LAMMPS. Овакав приступ, у којем су предвиђања модела проверена експериментом, а експериментални резултати разматрани на више просторних скала, омогућио је целовито вредновање испитиваних легура и остваривање постављених циљева дисертације.

3.4. Применљивост остварених резултата

Тема докторске дисертације одабрана је имајући у виду могућност практичне примене очекиваних резултата. Резултати истраживања могу се посматрати кроз неколико целина: (1) формирана и јавно доступна база експерименталних података о биокompatibilним легурама титана, са строго дефинисаним критеријумима укључивања, представља трајан ресурс који се непосредно може користити у будућим истраживањима и за развој нових модела; (2) развијена методологија предвиђања механичких својстава, заснована на композиционим дескрипторима и валидацији груписаној по публикацијама, примењива је као алат за претходни одабир перспективних састава, чиме се смањује број потребних експеримената и убрзава развој нових легура и смањују трошкове; (3) експериментално потврђена серија легура Ti–6,2Mo–xSn са Јанговим модулом еластичности од 79,26 до 85,31 GPa, знатно нижим од модула конвенционалних легура титана, представља полазну основу за даљи развој легура намењених медицинској примени; и (4) успостављени поступак повезивања локалног модула

еластичности са кристалографском оријентацијом α -ламела, комбиновањем наноиндентације, EBSD анализе, квантитативне анализе микроструктуре и атомистичких симулација, представља методолошки оквир применљив и на друге системе легура. Сprovedена испитивања, у комбинацији са анализом доступних литературних података, омогућила су значајан напредак у разумевању везе између хемијског састава, микроструктуре и Јанговог модула еластичности легура титана, као и у објективном оцењивању домета композиционог приступа дизајну легура. Легури са сниженим модулом еластичности овог типа имају потенцијалну примену у медицинској техници, пре свега за ортопедске и денталне импланте код којих се захтева смањење ефекта заштите од оптерећења, при чему су за клиничку примену неопходна даља испитивања биокompatibilности, корозионе постојаности и понашања при цикличном оптерећењу, док развијена методологија дизајна вођеног подацима има ширу применљивост у развоју металних материјала уопште.

3.5. Оцена достигнутих способности кандидата за самостални научни рад

Током досадашњих докторских студија и активног укључивања у научноистраживачки рад на пројектима, Гордана Марковић, мастер инж. металургије, испољила је висок ниво самосталности и зрелости у научноистраживачком раду. Кандидаткиња је овладала свим фазама истраживачког процеса, од критичког прегледа литературе и формулисања истраживачких питања, преко самосталног планирања и реализације експеримената и рачунарских симулација, до анализе, интерпретације и презентације добијених резултата. У досадашњем научноистраживачком раду публиковала је, као аутор и коаутор, један рад у врхунском међународном часопису (M21), два рада у истакнутим међународним часописима (M22) и један рад у часопису националног значаја (M52), при чему су рад категорије M21 и оба рада категорије M22 проистекли из истраживања у оквиру ове докторске дисертације. Поред тога, резултате својих истраживања представила је кроз три саопштења штампана у целини (M33) и четири саопштења штампана у изводу (M34) са научних скупова међународног значаја. На основу свега изложеног, Комисија закључује да кандидаткиња Гордана Марковић својим стручним компетенцијама, континуираним залагањем и квалитетом публикованих научних резултата у потпуности испуњава све услове за самосталан научноистраживачки рад.

4. ОСТВАРЕНИ НАУЧНИ ДОПРИНОС

4.1. Приказ остварених научних доприноса

Научни доприноси проистекли из истраживања у докторској дисертацији кандидаткиње Гордане Д. Марковић односе се на:

- формирање нове, критички пречишћене и јавно доступне базе експерименталних података о биокompatibilним легурама титана, која обухвата хемијски састав, поступке израде и механичка својства и представља основу за даљи развој и примену модела машинског учења у дизајну легура;
- развој модела машинског учења за предвиђање Јанговог модула еластичности, границе течења и затезне чврстоће легура титана, уз примену валидације са подацима груписаним по публикацијама, којом је добијена реална оцена способности модела за предвиђање својстава нових легура;
- утврђивање утицаја електронских и атомских параметара легирајућих елемената на предвиђање Јанговог модула, при чему су енергија d-орбитале и параметри стабилности β фазе идентификовани као најзначајнији показатељи;
- развој нових легура у систему Ti–Mo–Sn са сниженим Јанговим модулом еластичности, при чему су рачунарским избором састава, синтезом и експерименталном карактеризацијом легура Ti–6,2Mo–xSn ($x = 5, 10$ и 15 мас.%) остварене вредности Јанговог модула од 79 до 85 GPa;
- успостављање везе између локалних механичких својстава, кристалографске оријентације и микроструктуре легура титана применом наноиндентације, EBSD анализе, квантитативне анализе микроструктуре и атомистичких симулација, уз термодинамичку анализу стабилности фаза применом CALPHAD прорачуна;
- утврђивање могућности и ограничења модела заснованих на хемијском саставу за избор легура са циљаним механичким својствима и указивање на значај укључивања параметара микроструктуре и поступка израде у даљи развој модела.

4.2. Критичка анализа резултата истраживања

Преглед литературе из области дизајна легура титана показује све већу примену машинског учења за предвиђање механичких својстава, али и значајне разлике у квалитету и структури доступних података, начину валидације модела и степену експерименталне провере добијених предвиђања. У овој дисертацији посебна пажња посвећена је управо овим ограничењима. Валидацијом са подацима груписаним по публикацијама показано је да насумична подела података може довести до прецењивања тачности модела, док примењени приступ даје строжу и реалнију оцену његове способности за предвиђање својстава нових легура. Добијене вредности тачности модела указују да хемијски састав и изведени дескриптори садрже значајне информације о механичким својствима легура, али истовремено показују да се њима не може у потпуности описати варијабилност Јанговог модула, границе течења и затезне чврстоће. Значајан део одступања може се повезати са микроструктуром, термомеханичком историјом, фазним саставом и условима испитивања, који нису уједначено доступни у литературним изворима. Ово ограничење представља важан резултат дисертације, јер указује на правце даљег развоја база података и модела машинског учења у овој области. Експериментална провера одабраних састава у систему Ti–Mo–Sn потврдила је да машинско учење може успешно да усмери избор легура са сниженим Јанговим модулом еластичности. Истовремено, разлике између предвиђених и експериментално утврђених вредности показују да је за прецизније предвиђање неопходно укључити параметре микроструктуре и поступка израде. Резултати наноиндентације, EBSD анализе и атомистичких симулација додатно су показали значај кристалографске оријентације и локалне микроструктуре за вредности механичких својстава. Са становишта примене, развијене легуре представљају перспективну основу за даља истраживања материјала са сниженим модулом еластичности. За процену њихове стварне погодности за медицинску примену неопходна су додатна испитивања механичког понашања при цикличном оптерећењу, корозионе постојаности и биокompatibilности. Развијена база података и методологија истовремено представљају основу за даље проширење скупа података, укључивање микроструктурних и процесних параметара и развој поузданијих модела за избор састава легура са циљаним механичким својствима.

4.3. Верификација научних доприноса

Категорија M21:

1. Marković, G., Manojlović, V., Ružić, J., Sokić, M. (2023). Predicting Low-Modulus Biocompatible Titanium Alloys Using Machine Learning. *Materials*, 16(19), 6355. (IF=3,1) (ISSN: 1996-1944) (<https://doi.org/10.3390/ma16196355>)

Категорија M22:

1. 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. (IF=1,0) (ISSN: 1450-5339) (<https://doi.org/10.2298/JMMB240221019M>)
2. Marković, G., Dominguez-Gutierrez, F. J. (2026). Thermally activated plasticity in single-crystal titanium: a molecular dynamics study of nanoscale deformation. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 34(1), 015018. (IF=2,3) (ISSN: 0965-0393) (<https://doi.org/10.1088/1361-651x/ae2f77>)

5. ПРОВЕРА ОРИГИНАЛНОСТИ ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

На основу Правилника о поступку провере оригиналности докторских дисертација које се бране на Универзитету у Београду („Гласник Универзитета у Београду”, бр. 204/18), коришћењем програма iThenticate извршена је провера оригиналности докторске дисертације кандидаткиње Гордане Д. Марковић под називом „Развој и дизајн нових легура титана применом напредних рачунарских метода”. Утврђено је да подударање текста износи 13%. Овај степен подударности последица је општих места, личних имена и назива, дефиниција, устаљених фраза, референци и стручних термина и израза. На основу свега изложеног Комисија сматра да је докторска дисертација кандидаткиње Гордане Д. Марковић оригинална, као и да су у потпуности поштована академска правила цитирања, те се прописани поступак припреме за њену одбрану може наставити.

6. ЗАКЉУЧАК И ПРЕДЛОГ

Истраживања у оквиру ове дисертације припадају научној области Технолошко инжењерство, у оквиру уже научне области Металуршко инжењерство, за коју је матична установа Технолошко-металуршки факултет Универзитета у Београду. Докторска дисертација израђена је под менторством др Васа Манојловића, ванредног професора Технолошко-металуршког факултета Универзитета у Београду, и др Јоване Ружић, више научне сараднице Института за нуклеарне науке „Винча” – Института од националног значаја за Републику Србију Универзитета у Београду. На основу претходно изложене детаљне анализе резултата остварених у докторској дисертацији кандидаткиње Гордане Д. Марковић под називом „Развој и дизајн нових легура титана применом напредних рачунарских метода” (Development and Design of New Titanium Alloys Using Advanced Computational Methods), Комисија сматра да ова докторска дисертација представља значајан и оригиналан научни допринос развоју и дизајну биокompatibilних легура титана са сниженим Јанговим модулом еластичности, кроз повезивање машинског учења, рачунарског избора састава, експерименталне карактеризације и анализе утицаја микроструктуре на механичка својства. Предмет истраживања јасно је дефинисан, постављени циљеви су остварени, а спроведена истраживања прате савремене научне токове и доприносе новим сазнањима у овој области. Комисија стога сматра да докторска дисертација испуњава све прописане критеријуме и предлаже Наставно-научном већу Технолошко-металуршког факултета да усвоји овај реферат и да га, заједно са докторском дисертацијом кандидаткиње Гордане Д. Марковић под називом „Развој и дизајн нових легура титана применом напредних рачунарских метода” (Development and Design of New Titanium Alloys Using Advanced Computational Methods), изложи на увид јавности у законом предвиђеном року, а затим упутити Већу научних области техничких наука Универзитета у Београду на коначно усвајање.

3. септембра 2026. године

ЧЛАНОВИ КОМИСИЈЕ

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

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

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

.....
Др Франциско Хавијер Домингез Гутијерез (Francisco Javier Dominguez Gutierrez), ванредни професор
Национални центар за нуклеарна истраживања, Отвоцк, Пољска